МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет

В. Г. Зелевинский

Квантовая физика

Том 1

Основные понятия квантовой механики. Симметрии

Учебное пособие

Новосибирск
2014

УДК 539.1.01+539.182+539.18
ББК В318
З 48

Редактор перевода
д-р физ.-мат. наук В. Ф. Дмитриев
Рецензент
д-р физ.-мат. наук, проф. В. Г. Сербо.

Зелевинский, В. Г.
З 48 Квантовая физика: учеб. пособие/ В. Г. Зелевинский ; Новосиб. гос. ун-т. — Новосибирск : РИЦ НГУ, 2014: Т. 1. Основные понятия квантовой механики. Симметрии. — 502 с.

ISBN 978-5-4437-0322-0

Учебное пособие содержит современное изложение основных фундаментальных положений квантовой физики с их применением в атомной и ядерной физике. В первом томе курса подробно рассматриваются понятийный аппарат квантовой механики, включающий волновую функцию, квантовую динамику, дискретные и непрерывные симметрии, а также математические методы и их применение к конкретным проблемам. Прослеживается связь квантовой механики с классической. Изложение материала в каждой из 15 глав осуществляется по принципу от простого к сложному. Разделы глав, наряду с теорией, включают задачи и их решения в количестве, достаточном для полноценного усвоения материала. Издание предназначено для студентов физических и физико-технических факультетов.

УДК 539.1.01+539.182+539.18
ББК В318

© Новосибирский государственный университет, 2014
ISBN 978-5-4437-0322-0
© В. Г. Зелевинский, 2014

All Rights Reserved. Authorised translation from the English language edition by Wiley-VCH Verlag GmbH & KGaA. Responsibility for the accuracy of the translation rests solely with Licensee Nameand is not the responsibility of Wiley-VCH Verlag GmbH & KGaA. No part of this book may be reproduced in any form without the written permition of the original copyright holder, Wiley-VCH Verlag GmbH & KGaA.

© 2011 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany

All rights reserved (including those of translations into other languages). No part of this book may be reproduced in any form – by photoprinting, microfilm, or any other means – nor transmitted or translated into a machine language without written permission from the publishers. Registered names, trademarks, etc. used in this book, even when not specifically marked as such, are not to be considered unprotected by law.

Оглавление

Предисловие редактора перевода **11**

Предисловие автора к русскому изданию **12**

Предисловие **13**

1 Происхождение основных квантовых понятий **17**
1.1 Свет: волна или частица? 17
1.2 Постоянная Планка, начало квантовой эры 18
1.3 Фотоны 20
1.4 Спектроскопия и стабильность атомов 22
1.5 Постулаты Бора 23
1.6 Атом водорода 27
1.7 Принцип соответствия 35
1.8 Пространственное квантование 39
1.9 Спин 40
1.10 Волны де Бройля 42

2 Волновая функция и простейшие задачи **45**
2.1 Свободное движение 45
2.2 Плотность и поток вероятности 47
2.3 Принцип суперпозиции и неопределённость 50
2.4 Потенциальная стенка 51
2.5 Потенциальный барьер 54
2.6 Проникновение под барьер 58
2.7 Туннелирование 59

3 Связанные состояния **67**
3.1 Потенциальный ящик 67
3.2 Ортогональность и полнота 70

3.3 Дельта-функция* 72
3.4 Эволюция волновой функции со временем 75
3.5 Мелкая яма и квантовое гало 79
3.6 Резонансы 88
3.7 Плотность уровней 89
3.8 Периодические граничные условия 92
3.9 Считаем уровни в гладком потенциале 94

4 Динамические переменные 99
4.1 Импульсное представление 99
4.2 Знакомство с операторами 102
4.3 Коммутаторы 105
4.4 Собственные функции и собственные значения 109
4.5 Импульс как генератор сдвига 110
4.6 Введение в теорию групп* 113
4.7 Момент импульса как генератор вращения 115
4.8 Преобразование операторов 117

5 Соотношения неопределённостей 123
5.1 Соотношение неопределённости в волновой механике 123
5.2 Простые примеры 126
5.3 Дополнительность и вероятность 131
5.4 Волновой пакет: распространение 135
5.5 Расплывание волнового пакета 138
5.6 Оценки по соотношению неопределённостей 142
5.7 Классификация молекулярных возбуждений 149
5.8 Ширина уровня 152
5.9 Ширина линии и эффект Мёссба́уэра 156
5.10 Виртуальные процессы и релятивистские эффекты 158
5.11 Ещё раз о пространственном квантовании 161

6 Гильбертово пространство и операторы 167
6.1 Амплитуда вероятности 167
6.2 Суперпозиция и интерференция 168
6.3 Векторы состояния 172
6.4 Геометрия гильбертового пространства* 174
6.5 Линейные операторы* 179
6.6 Эрмитовы операторы* 182
6.7 Свойства эрмитовых операторов* 184

6.8 Диагонализация⋆ . . . 187
6.9 Преобразования базиса⋆ . . . 189
6.10 Непрерывные преобразования и генераторы⋆ . . . 192
6.11 Проекционные операторы⋆ . . . 194
6.12 Операторы наблюдаемых . . . 196
6.13 Одновременная измеримость . . . 200
6.14 Количественное описание соотношения неопределённостей . . . 202

7 Квантовая динамика 211
7.1 Гамильтониан и уравнение Шрёдингера . . . 211
7.2 Одночастичный гамильтониан . . . 214
7.3 Уравнение непрерывности . . . 222
7.4 Распределение Вигнера . . . 227
7.5 Картина Гейзенберга . . . 229
7.6 Операторная динамика . . . 230
7.7 Теорема вириала . . . 235
7.8 Вероятность выживания . . . 236
7.9 Правила сумм . . . 239
7.10 Законы сохранения . . . 243
7.11 Формулировка с интегралом по траекториям . . . 246
7.12 Связь с классической механикой . . . 249
7.13 Возвращение к картине Шрёдингера . . . 251
7.14 Квантовая эволюция и ортогонализация . . . 255

8 Дискретные симметрии 261
8.1 Инвариантность относительно обращения времени . . . 261
8.2 Преобразование операторов при обращении времени . . . 264
8.3 Инверсия и чётность . . . 266
8.4 Скаляры и псевдоскаляры, векторы и псевдовекторы . . . 267
8.5 Сохранение чётности . . . 270
8.6 Симметрия кристаллической решётки . . . 274
8.7 Квазиимпульс и функции Блоха . . . 275
8.8 Энергетические зоны . . . 279
8.9 Симметрия молекул . . . 281
8.10 Ещё теория групп: сопряжённые классы* . . . 286
8.11 Представления групп* . . . 286
8.12 Ортогональность и полнота* . . . 290
8.13 Характеры* . . . 293

9 Одномерное движение: континуум 299
9.1 Задача на собственные значения 299
9.2 Непрерывный спектр 301
9.3 Вырождение в континууме 304
9.4 Матрица перехода 307
9.5 Время задержки 309
9.6 Однородное поле 312
9.7 Функция Эйри и функции Бесселя* 314
9.8 Асимптотическое поведение* 318
9.9 Асимптотика функции Эйри* 320
9.10 Функция Грина для одномерного рассеяния 324
9.11 Потенциал как возмущение 330
9.12 Квазистационарные состояния 333

10 Вариационный подход и диагонализация 337
10.1 Вариационный принцип 337
10.2 Прямой вариационный метод 340
10.3 Диагонализация в усечённом базисе 342
10.4 Двухуровневая система 343
10.5 Расталкивание и непересечение уровней 346
10.6 Эволюция во времени двухуровневой системы 349
10.7 Яркое состояние и фрагментация 352
10.8 Коллективные состояния 356
10.9 Алгоритм Ланцоша 360

11 Дискретный спектр и гармонический осциллятор 363
11.1 Одномерные связанные состояния 363
11.2 Линейный гармонический осциллятор 365
11.3 Полиномы Эрмита⋆ 373
11.4 Гармонический осциллятор в плоскости 379
11.5 Изотропный осциллятор 380
11.6 Решение задачи в полярных координатах 383
11.7 Лестничная конструкция 387
11.8 Операторы рождения и уничтожения 388
11.9 Операторное решение для гармонического осциллятора 392

12 Когерентные и сжатые состояния 395
12.1 Определение когерентных состояний 395
12.2 Сдвиги на фазовой плоскости 397

12.3 Свойства когерентных состояний 399
12.4 Когерентные состояния гармонического осциллятора 402
12.5 Линейный источник 403
12.6 Квазиклассический предел, число квантов и фаза 406
12.7 Двухквантовый источник 408
12.8 Сжатые состояния 413
12.9 Подробнее о сжатых состояниях 416

13 Включение магнитного поля 423
13.1 Магнитное поле в классической механике 423
13.2 Квантовая формулировка и калибровочная инвариантность . . 425
13.3 Наблюдаемы ли электромагнитные потенциалы? 429
13.4 Уровни Ландау: энергетический спектр 431
13.5 Уровни Ландау: вырождение и волновые функции 434
13.6 Квантовый эффект Холла 439
13.7 Произвольный закон дисперсии 443
13.8 Симметричная калибровка 448
13.9 Когерентные состояния в магнитном поле 450

14 Макроскопическая квантовая когерентность 453
14.1 Идея макроскопической когерентности 453
14.2 Макроскопическая волновая функция [1, 2] 455
14.3 Гидродинамическое описание 456
14.4 Динамика макроскопического когерентного состояния 459
14.5 Эффекты Джозефсона 461
14.6 Квантование циркуляции и квантовые вихри 466
14.7 Квантование магнитного потока и электродинамика Лондона . 471

15 Квазиклассическое (ВКБ) приближение 475
15.1 Эвристическое введение 475
15.2 Квазиклассическое приближение 479
15.3 Асимптотическое разложение 482
15.4 Стационарная фаза 484
15.5 Условия сшивки 485
15.6 Квантование Бора — Зоммерфельда 490
15.7 Квазиклассические матричные элементы 493
15.8 Решения в комплексной плоскости⋆ 496
15.9 Обход в комплексной плоскости⋆ 499
15.10 Ещё раз о формулах сшивки⋆ 501

15.11 Близкие точки поворота* 503
15.12 Подход с использованием интеграла по путям 508

Список литературы **513**

Предметный указатель **519**

Предисловие редактора перевода

Двухтомный курс квантовой физики известного теоретика, специалиста по квантовой теории многих тел, профессора Университета штата Мичиган Владимира Зелевинского, изданный в 2011 г., является уникальным по широте охвата материала. В курсе обсуждаются квантовые эффекты, начиная с субатомных и атомных масштабов и кончая масштабами макроскопических тел. Ещё одно достоинство пособия — многоуровневость изложения. Данным учебником может пользоваться как начинающий изучать квантовую механику, так и более продвинутый читатель, желающий углубить своё знание квантовой теории.

Для удобства изучения курса издание на русском языке сделано в трёх томах, в соответствии с семестровыми программами курсов на физическом факультете НГУ. Перевод был выполнен: главы 1–5 — А. М. Балдиным, главы 6–12 — В. А. Таюрским, главы 13–15 — З. К. Силагадзе. Перевод эпиграфов — А. В. Кобковой, А. Р. Нестеренко. Создание макета и вёрстка тома — А. М. Балдин.

Издание этого курса на русском языке стало возможным благодаря организационной работе А. Р. Нестеренко. Мы признательны НГУ и физическому факультету за содействие.

В. Ф. Дмитриев

Предисловие автора к русскому изданию

Книга, которую читатель держит в руках, была издана три года назад (Wiley-VCH, 2 тома) на английском языке. Она «выросла» из лекций по квантовой механике, которые автор читал на физическом факультете Новосибирского университета, начиная с 1965 г. Однако эта книга заметно «повзрослела» и по стилю, и по содержанию (не говоря об объёме), благодаря новому опыту, приобретённому автором в Дании (Niels Bohr Institute) и США (Michigan State University). Кажется, и студенты сейчас другие...

Я благодарен Новосибирскому университету и его ректору Михаилу Федоруку за помощь в издании. Большая работа группы переводчиков, руководимая и координируемая Владимиром Дмитриевым, сделала возможным издание в сравнительно короткий срок. Особой благодарности заслуживает Альфия Нестеренко, вложившая так много усилий в организацию издания.

Остаётся надеяться, что и новому поколению студентов (как и преподавателей) книга будет полезной.

г. Ист-Лансинг, Мичиган. Февраль 2014 г. /*Владимир Зелевинский*/

Предисловие

Эта книга основана на лекциях, которые читались в течение многих лет в России (Новосибирский государственный университет), США (Университет штата Мичиган) и Дании (Институт Нильса Бора, Копенгаген). Российский опыт был вначале обобщён в двух небольших пособиях с рукописными формулами и много позже — в книге «Лекции по квантовой механике». Но в том виде книга абсолютно не годилась для аспирантского курса в американском университете. Нынешнее пособие является полностью новым, хотя и сохраняет дух оригинала. Два тома текста логически соответствуют двум семестрам курса.

Как стало ясно после многих лет преподавания аспирантских курсов, необходимых для получения степени доктора философии, основной проблемой является то, что аспиранты, приходя в большой университет (такой как Университет штата Мичиган) с очень разным уровнем подготовки, должны в течение курса овладеть некоторым общим уровнем знаний, который позволил бы им продвигаться дальше к более сложным вопросам современной науки. Я пытался использовать различные популярные учебники, но каждый раз было необходимо дополнять их собственными заметками. В конце концов стало ясно, что легче и полезнее последовательно полагаться на свой собственный текст, который должен быть правильно упорядочен, снабжён задачами и дополнительным материалом, дающим возможность преподавателю отобрать его для более продвинутых студентов.

Книга начинается с самых фундаментальных принципов квантовой теории и продолжается методом, который представляется мне наиболее логичным и наиболее подходящим для такой разноуровневой аудитории. Сначала в пособии рассматривается много задач, которые не требуют полного квантового формализма, но позволяют студентам приобрести некоторый опыт квантового мышления. Только после этого вводится фундаментальное уравнение Шрёдингера и мы переходим к более широкому кругу приложений во всех областях квантовой физики. Задачи даются внутри текста; их решение или хотя бы понимание абсолютно необходимо. Имеется много как тради-

ционных задач, так и новых задач, связанных с современным развитием физики. Текст написан так, что каждая тема содержит несколько уровней сложности, чтобы преподаватель мог самостоятельно выбирать глубину изложения предмета. При тщательном отборе этот материал может также использоваться и на младших курсах.

Объём и границы этой книги поставили меня перед трудным выбором исключить некоторые важные и интересные вопросы. В пособии имеются темы, которые обычно не входят в общие курсы, но, по моему мнению, должны присутствовать в современных учебных планах — например, когерентные и сжатые состояния и их макроскопические аналоги, тензорные операторы и их приложения, некоторые вопросы релятивистской квантовой механики и теории рассеяния, свойства взаимодействующих многочастичных систем, квантовый хаос и запутанность. Дополнительный материал выходит далеко за пределы стандартных курсов и должен позволить лектору осуществить соответствующий отбор для конкретной аудитории. Параллельно можно работать со студентами более высокого уровня над современными проблемами, что я обычно и делал. По тексту разбросаны также несколько математических отступлений о методах, неизвестных в большинстве случаев студентам, например, таких, как комплексный анализ и элементы теории групп (эти разделы помечены звёздочкой). Поэтому текст является самодостаточным и не требует привлечения дополнительных источников. Тем не менее в конце каждой главы даётся список «Дополнительной литературы», включающий ссылки на текущие научные журналы. Я полагаю, очень важно продемонстрировать, что квантовая теория не содержит никаких магических трюков и что всё может быть выведено и объяснено на доске прямо на глазах у студентов.

Этот подход был испытан в течение нескольких лет и оказался успешным, хотя в первоначальный период ошибки были неизбежны. Успех, конечно, в высшей степени зависит от усиленной работы студентов, которая, в свою очередь, инициируется их интересом к предмету.

В течение этих лет я очень много полезного получил из дискуссий с замечательными учёными в разных странах. К сожалению, нет возможности перечислить вклад каждого из них. Но я хотел бы выразить особую признательность ушедшему от нас Карлу Гооде, который постоянно поддерживал и убеждал меня написать лекции в форме, пригодной для публикации. Я очень благодарен Роману Сенькову и Александру Воля за их полезное участие. Дружеское расположение и постоянная помощь издателей, в особенности Валери Мольер, Ани Щёртнер и Петры Мёвс, были неоценимы.

В таком внушительном тексте вряд ли возможно избежать недосказанностей и ошибок. Я был бы особенно благодарен читателям за любой конструктивный отклик.

Наконец, в течение тех лет, когда мои вечера были посвящены написанию этого курса, я постоянно получал большую поддержку со стороны сына, дочери и их семей. Я в бесконечном долгу перед моей женой Верой, чьё чудесное терпение сделало возможным выполнение этой работы.

г. Ист Лансинг, Мичиган, июнь 2010 г. /*Владимир Зелевинский*/

Науки о природе видят славу Божию
в сокрытии её таинств, а славу царей —
в умении их понять.
*Фрэнсис Бэкон, «Великое
восстановление наук»*

Глава 1

Происхождение основных квантовых понятий

Строго говоря, привычное название *«квантовая механика»* является устаревшим. Сейчас гораздо уместней говорить о единой квантовой теории (quantum theory), которая охватывает все разделы точных наук от биофизики до физики высоких энергий и космологии. Эта теория, с одной стороны, является основой современного научного мировоззрения, а с другой — базой для реального технического прогресса (компьютеры, квантовая электроника, нанотехнологии, ядерная и термоядерная энергетика, сверхпроводимость и т. д.). Вопреки (или, может быть, благодаря) своему всеобъемлющему характеру, квантовая теория теперь может строиться чисто аксиоматически (подобно формальной термодинамике). Таким образом можно было бы избежать в процессе изучения хронологического повторения сложной и порой противоречивой линии развития квантовой физики. Однако хотя бы краткое знакомство с историей возникновения основных идей квантовой теории поучительно и, пожалуй, необходимо.

1.1 Свет: волна или частица?

Первым источником квантовых понятий был вопрос о природе света. В XIX в. среди физиков доминировала *волновая теория света.* Уже в 1802 г. *Томас Юнг* объяснил явление оптической интерференции, используя принцип *суперпозиции* волн. При фиксированных фазовых соотношениях суперпозиция является *когерентной.* Это позволяет наблюдать типичные интерференционные эффекты, как в стандартном опыте (рис. 1.1), в котором демонстрируются первичный и вторичные интерференционные максимумы для света, прошедшего через две щели.

Волновые представления о природе света были окончательно сформированы как следствие *уравнений Максвелла* (1861). Эти уравнения допускают

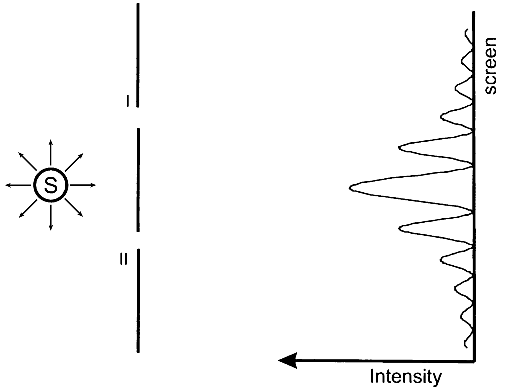

Рис. 1.1: Интерференция на двух щелях

распространение электромагнитных волн в свободном пространстве (вдали от источников, зарядов или токов). В силу *линейности* уравнений справедлив принцип суперпозиции, т. е. сумма двух решений также является возможным решением. Из принципа суперпозиции следует всё многообразие явлений интерференции и дифракции, а также законов распространения света через вещество (отражение, преломление, дисперсия, рассеяние и др.).

С другой стороны, ещё *Ньютон* придерживался *корпускулярной* точки зрения на природу света. Кроме простых аргументов, связанных с прямолинейным распространением света (*геометрическая оптика*), он опирался на *монистическое* представление о мире: признав атомизм вещества, было бы странным допустить, что структура света и структура вещества являются принципиально различными, а тогда естественно допустить и существование корпускул света.

1.2 Постоянная Планка, начало квантовой эры

Только после двух столетий накопления экспериментальных данных вера в корпускулы света смогла трансформироваться в научную гипотезу. Во-первых, было доказано атомное строение вещества, а после этого экспериментальные данные, относящиеся к излучению чёрного тела, заставили *Макса Планка* в 1900 г. вновь обратиться к идеям дискретной природы света. Таким образом, начало квантовой физики совпало с началом XX в.

Известно, что электромагнитное поле, заключённое в некоторый объём, можно представить как набор гармонических осцилляторов, отвечающих

различным частотным составляющим поля. Планк показал, что правильное (наблюдаемое) распределение энергии в спектре такого равновесного («*чёрного*») излучения нельзя получить, считая, что осцилляторы поля приобретают и теряют энергию непрерывно. Необходимо было принять, что для каждого осциллятора частоты ν процессы поглощения и потери энергии могут идти лишь *дискретными* шагами, порциями энергии $\Delta E = h\nu$, где h — новая мировая константа. *Постоянная Планка* — это *квант действия*:

$$h = 6.6262 \cdot 10^{-34}\,\text{Дж} \cdot \text{с} = 6.6262 \cdot 10^{-27}\,\text{эрг} \cdot \text{с}. \tag{1.1}$$

В классической механике действие — это интеграл $\int \mathcal{L} dt$ от лагранжиана $\mathcal{L}$ вдоль траектории движения физической системы. Размерность действия [энергия $\times$ время $=$ импульс $\times$ расстояние] совпадает с размерностью момента импульса. *Квантование* действия позволит нам позже перекинуть мостик между классической и квантовой теориями.

Обычно удобнее использовать *циклическую частоту* $\omega = 2\pi\nu$ и писать $h\nu = \hbar\omega$, где

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \cdot 10^{-27}\,\text{эрг} \cdot \text{с}. \tag{1.2}$$

В квантовой физике наиболее естественной единицей измерения энергии является *электронвольт* — работа, совершаемая электроном при прохождении потенциала в 1 В. Зная заряд электрона $e = 1.6022 \cdot 10^{-19}$ кулон, можно получить:

$$1\,\text{эВ} = 1.6022 \cdot 10^{-19}\,\text{Кл} \cdot \text{В} = 1.6022 \cdot 10^{-12}\,\text{эрг}. \tag{1.3}$$

В ядерной физике и физике элементарных частиц совместно с единицей электронвольт часто используются префиксы *кило-*, *мега-*, *гига-*, *тера-*: 1 кэВ $= 10^3$ эВ, 1 МэВ $= 10^6$ эВ, 1 ГэВ $= 10^9$ эВ, 1 ТэВ $= 10^{12}$ эВ (те же префиксы, которые используются для определения размера компьютерной памяти). Для облегчения оценки порядка физических величин в будущем можно заметить, что часто достаточно скомбинировать постоянную Планка со скоростью света c и запомнить результат:

$$\hbar c \approx 200\,\text{МэВ} \cdot \text{фм}, \tag{1.4}$$

где 1 фм $= 10^{-13}$ см $= 10^{-15}$ м.

На этой стадии можно пользоваться следующей предварительной картиной: поле излучения «состоит» из элементарных единиц — *квантов*, а

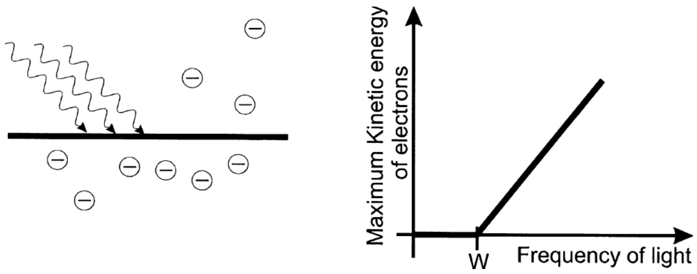

Рис. 1.2: Фотоэффект

энергия осциллятора частоты ω, $E = n\hbar\omega$, определяется числом квантов поля n, каждый из которых несёт энергию $\hbar\omega$. Остаётся неясным, справедливо ли это для любых физических систем, локализованы ли эти кванты в пространстве и т. д.

1.3 Фотоны

Следующий важный шаг был сделан *Эйнштейном* (1905). Он показал, что если считать равновесное («чёрное») излучение газом частиц с энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом $p = E/c = \hbar k$, где $k = \omega/c$ — волновой вектор, то, по крайней мере для достаточно больших ω, формула Планка для энтропии чёрного излучения может быть получена так же, как для «нормальных» частиц в обычной кинетической теории газов. Эмпирические закономерности *фотоэффекта* (выбивание электронов из вещества под действием света, рис. 1.2), например, то, что изменение интенсивности света не влияет на энергию фотоэлектронов, а лишь пропорционально меняет их число, немедленно следуют из сохранения энергии в каждом индивидуальном акте поглощения кванта.

Каждый металл характеризуется величиной *работы выхода* W, которая равна минимальной энергии, нужной для выбивания электрона из твёрдого тела. Это аналог *ионизационного потенциала* для атомов или *энергии отделения* для ядер. Если квант света с частотой ω поглощается электроном в металле, то максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов равна

$$K_{\text{макс.}} = \hbar\omega - W \tag{1.5}$$

и не зависит от интенсивности падающего света, а определяется элементарным актом взаимодействия. Экспериментальное подтверждение *Миллике-*

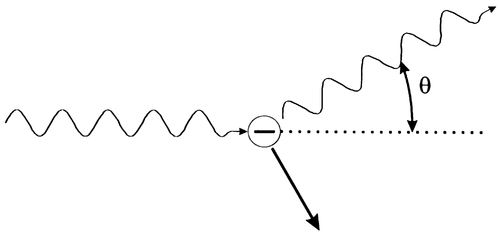

Рис. 1.3: Эффект Комптона

ном (1915) этого соотношения фактически было одним из первых прямых измерений постоянной Планка.

Итак, мы имеем новый элементарный объект — квант света или *фотон* (это имя было предложено гораздо позднее). С другой стороны, согласно специальной теории относительности, для любой свободной частицы существует связь между энергией и импульсом:

$$E^2 = c^2p^2 + (mc^2)^2. \tag{1.6}$$

Применимость этой формулы к фотонам была проверена в опытах по рассеянию электромагнитных волн на электронах. Эксперименты (*Комптон*, 1923) показали, что фотон ведёт себя как частица с $m = 0$ и $E = cp$. Экспериментальный результат согласуется с выражением

$$\Delta\lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{1.7}$$

для увеличения длины волны фотона $\lambda = 2\pi c/\omega$ и, следовательно, уменьшения его частоты и энергии при рассеянии на угол θ на первоначально покоящейся частице массы m (рис. 1.3). Формула (1.7) является прямым следствием соотношения $E = \hbar\omega$ и законов сохранения энергии и импульса.

Задача 1.1

Вывести формулу (1.7); оценить длину волны, необходимую для измерения эффекта Комптона на электронах.

Задача 1.2

Непосредственной проверкой корпускулярных свойств света является измерение отдачи атомов при излучении. В опытах *Фриша* (1933) атомы натрия излучали свет с длиной волны $\lambda = 589$ нм. Оценить скорость отдачи атомов.

Очевидно, что результат (1.7) нельзя получить из классических уравнений, не содержащих постоянной Планка. Суммируя эти знания с предыдущими идеями, мы видим, что свет в различных экспериментах проявляет свойства как *волн*, так и *частиц*. Волновые аспекты вытекают из уравнений Максвелла. Корпускулярная картина показывает, что поле не только несёт импульс и энергию, но при обмене ими с веществом ведёт себя как набор отдельных частиц. «Словарик» для связи между корпускулярным (энергия и импульс) и волновым (частота и волновой вектор) языками выглядит так:

$$E = \hbar\omega; \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \tag{1.8}$$

или для длины волны:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi}{k}. \tag{1.9}$$

Иногда удобно ввести

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k} = \frac{\hbar}{p}. \tag{1.10}$$

Таким образом получается, что постоянная Планка — это просто *масштабный коэффициент*, применяемый для перевода между двумя этими языками.

1.4 Спектроскопия и стабильность атомов

К началу XX в. в дискретности вещества уже не было сомнений. Было твёрдо установлено существование элементарных носителей электрического заряда (электронов), нейтральных атомов, а также молекул, состоящих из атомов. Было замечено, что пучок электронов (*катодные лучи*) в электромагнитных полях подчиняется классическим законам движения. Однако это не так для системы электронов, локализованных в конечной области пространства, такой как атом с размером около 10^{-8} см. В своих опытах *Резерфорд* (1911) обнаружил наличие в атоме тяжёлого ядра крайне малых $\sim 10^{-13}$ см $\equiv 1$ фм размеров с положительным электрическим зарядом, компенсирующим полный заряд атомных электронов. Классическая механика и электродинамика не могли объяснить стабильность атомов. Статическая система зарядов, связанных лишь *электростатическими* силами, является неустойчивой (*теорема Ирншоу*). В то же время в планетарной модели

атома, понимаемой буквально, электроны, которые движутся по кулоновским орбитам (как в случае *задачи Кеплера* для гравитационного поля), излучают энергию, как и все ускоренные заряды. Вследствие излучения электроны должны терять энергию и в конце концов упасть на ядро.

Ключ к решению загадки дала атомная спектроскопия. Спектры излучения и поглощения паров химических элементов, т. е. фактически отдельных атомов, представляют собой серии характерных для данного элемента очень узких *спектральных линий*, отвечающих определённым длинам волн. Эмпирическая обработка огромного количества спектроскопических данных привела к *комбинационному принципу Ритца*: испускаемые длины волн λ могут быть выражены через разности *спектральных термов* T_n, которые можно нумеровать *целыми числами* (n' и n):

$$\frac{1}{\lambda} = T_{n'} - T_n. \tag{1.11}$$

Так, для водорода справедлива *формула Бальмера*

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\mathrm{H}} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \tag{1.12}$$

где $R_{\mathrm{H}} = 109678\,\text{см}^{-1}$ — *постоянная Ридберга*. Подобные закономерности были найдены и для других элементов, причём масштаб (аналог постоянной R_{H}) растёт для более тяжёлых элементов. Комбинационный принцип (1.11) не похож на известные законы классических излучателей, типичным примером которых служит вибратор, излучающий основную гармонику частоты ω_0 и её обертоны $n\omega_0$. В планетарной модели атома частота ω_0 должна была бы совпадать с частотой обращения электрона на орбите.

1.5 Постулаты Бора

Революционный шаг, заложивший основы квантовой теории, был сделан *Нильсом Бором (1913)*. Постулаты Бора позволили построить непротиворечивую модель атома и объяснить основные экспериментальные факты. Правда, сами постулаты — зародыш будущей науки — пока выглядели чужеродным довеском к классической физике.

Согласно Бору, атом (для простоты будем говорить о водороде, т. е. об атоме, состоящем из тяжёлого положительно заряженного протона в центре и лёгкого электрона на орбите), действительно, напоминает солнечную систему. Однако среди классических орбит существуют выделенные,

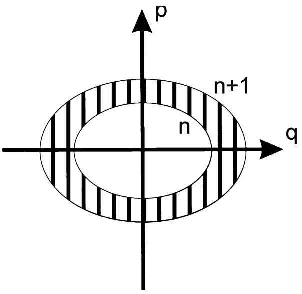

Рис. 1.4: Квантование в фазовом пространстве

отвечающие *стационарным состояниям*, где электроны вращаются в кулоновском поле ядра без излучения. Аналогичные утверждения делаются в отношении других классических систем, совершающих конечное периодическое движение. Стабильные орбиты образуют *дискретную* совокупность (*квантованы*). Опираясь на существование кванта действия h, Бор постулировал, что для устойчивых орбит классическое действие за период ([1] § 49) равно целому числу квантов:

$$\oint p\,dq = nh = 2\pi n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots . \tag{1.13}$$

Для круговой орбиты радиуса r и постоянной скорости v это эквивалентно квантованию момента импульса ℓ:

$$p = mv, \quad \oint dq = 2\pi r \quad \rightsquigarrow \quad \ell = mvr = n\hbar. \tag{1.14}$$

Здесь впервые возникает *квантовое число* n, нумерующее стационарные квантовые состояния.

Фазовый интеграл $\oint pdq$, где p и q — это *канонически сопряжённые* импульс и координата, вычисляется за период движения вдоль замкнутой классической траектории с энергией E. Этот интеграл равен площади фазового пространства (p, q), ограниченного траекторией движения (рис. 1.4). Из классической механики известно, что эта величина является *адиабатическим инвариантом*. Если параметры системы изменяются медленно (адиабатически), то такие величины остаются постоянными, или, точнее, изменяются гораздо слабее, чем внешние условия. Обычно, если время изменения параметров системы характеризуется величиной τ ($\tau \gg T$, где T — период движения), то изменение адиабатического инварианта пропорционально $\propto \exp(-\tau/T)$. Квантоваться могут только подобные классические величины, а иначе условие (1.13) будет несогласованным, так как медленное

изменение параметров не меняет левой части, но в какой-то момент приводит к внезапному скачку квантового числа в правой части, которая может принимать только дискретные значения. Напротив, мы видим, что изменяя параметры адиабатического инварианта, мы не меняем дискретную метку n и классификация квантовых уровней остаётся стабильной.

Задача 1.3

Частица совершает малые колебания вокруг положения равновесия под действием упругой силы $F = -\kappa x$, где x — отклонение от положения равновесия. Такая система, *линейный гармонический осциллятор*, в классической механике описывается *функцией Гамильтона*, которая в данном случае есть просто сумма кинетической и потенциальной энергий:

$$H = K(p) + U(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\kappa x^2. \tag{1.15}$$

Покажите, что в соответствии с правилом (1.13) квантованные энергетические уровни E_n образуют *эквидистантный спектр*:

$$E_n = n\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}. \tag{1.16}$$

Решение.

Для симметричного потенциала $U(x) = U(-x)$ (рис. 1.5) условие квантования (1.13) принимает вид

$$4\int_0^{x_n} dx\,\sqrt{2m[E - U(x)]} = 2\pi n\hbar, \tag{1.17}$$

где x_n — это зависящая от энергии классическая *точка поворота*, в которой $U(x_n) = E$. Для вычисления интеграла введём переменную $y(x) = U(x)/E$. Это приводит к интегралу $\int_0^1 dy$ в фиксированных пределах. Так как $dx/dy \propto 1/\sqrt{y}$, то с помощью подстановки $y = \sin^2\xi$ приходим к элементарному интегралу $\int_0^{\pi/2} d\xi\, \cos^2\xi = \pi/4$.

В случае гармонического осциллятора можно избежать вычислений, заметив, что область фазового пространства (p, x), ограниченная орбитой с энергией E, есть эллипс $x^2/a^2 + p^2/b^2 = 1$ с полуосями $a = \sqrt{2E/m\omega^2}$ и $b = \sqrt{2mE}$. Площадь такого эллипса равна $I = \pi ab = 2\pi E/\omega$. Амплитуда колебаний для конкретной энергии равна $A_n = \sqrt{n(2\hbar/m\omega)}$.

Постулат Бора согласуется с нашим «словариком» (1.8). Если свободное электромагнитное поле может быть представлено набором независимых

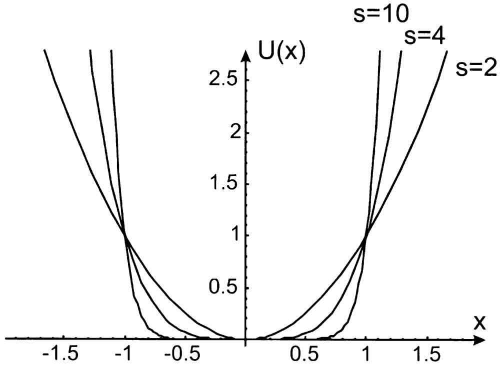

Рис. 1.5: Потенциалы $U \sim |x|^s$

осцилляторных мод разной частоты, то квантование (1.16) приписывает конкретное число квантов соответствующей частоты каждому стационарному состоянию данной моды. Это и есть целое число n в постулате квантования. Точное квантово-механическое решение для гармонического осциллятора, которое будет рассмотрено в разделе 11, дает энергетический спектр

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{1.18}$$

Самый нижний (*основной*) уровень $n = 0$ больше не соответствует состоянию с $E = 0$, как это было бы в случае классической частицы, покоящейся в точке равновесия. Энергия *нулевых колебаний* равна $\hbar\omega/2$. В случае электромагнитного поля это означает, что даже состояние без фотонов (*вакуум*) обладает энергией из-за *квантовых флуктуаций*. Принцип квантования в форме (1.13) верен только для возбуждённых состояний с $n \gg 1$.

Задача 1.4

Как зависит энергия n-го уровня в потенциале $U(x) = \alpha|x|^s$ от квантового числа n?

Решение.

Используя метод из решения задачи 1.3, получаем фазовый интеграл $\propto E^{(2+s)/2s}$ и

$$E_n \propto n^{2s/(2+s)}. \tag{1.19}$$

Важные частные случаи: $E_n \propto n$ (гармонический осциллятор, $s = 2$ как в задаче 1.3); $E_n \propto n^{4/3}$ ($s = 4$), рис. 1.5; $E_n \propto n^2$ (яма с вертикальны-

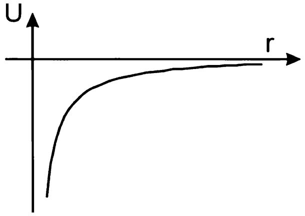

Рис. 1.6: Притягивающий кулоновский потенциал

ми стенками, раздел 3.1, $s \to \infty$); $E_n \propto 1/n^2$ (Кулоновский потенциал, формула (1.26) ниже по тексту).

Второй постулат Бора необходим для квантовой формулировки закона сохранения энергии в радиационных переходах. Акты излучения и поглощения света протекают как переходы между начальным i и конечным f состояниями. Так как фотон имеет энергию $\hbar\omega$, то закон сохранения энергии имеет вид

$$E_f - E_i = \pm\hbar\omega, \tag{1.20}$$

где плюс и минус соответствуют поглощению $E_f > E_i$ и излучению $E_f < E_i$ соответственно. Возможность излучения означает, что дискретные состояние, найденные в предположении отсутствия излучения, на самом деле являются *квазистационарными* и имеют *конечное время жизни*. Квантование без учёта излучения имеет смысл только пока период движения много меньше времени жизни.

1.6 Атом водорода

Теперь применим боровское квантование к атому водорода, рис. 1.6. Эта система состоит из неподвижного тяжёлого протона (заряд $+e$) в начале координат и электрона (заряд $-e$, масса m), движущегося по круговой (для простоты) кулоновской орбите вокруг протона. Для орбиты радиуса r и скорости v действующая сила, согласно ньютоновской механике, равна

$$F = \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}. \tag{1.21}$$

Полная энергия электрона, сумма его кинетической K и потенциальной U энергий, *отрицательна*:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} = \frac{U}{2}. \tag{1.22}$$

Квантование (1.13), в силу (1.21), может быть записано как

$$n^2\hbar^2 = (mvr)^2 = mre^2. \tag{1.23}$$

Это позволяет определить радиусы стабильных орбит:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2}\, n^2 \equiv an^2, \tag{1.24}$$

где a — *боровский радиус* (радиус ближайшей к ядру водородной орбиты), который равен

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529\,\mathring{A} = 0.529 \cdot 10^{-8}\,\text{см} = 0.0529\,\text{нм}. \tag{1.25}$$

Для больших квантовых чисел, $n \gg 1$, радиус (1.24) становится макроскопическим, например, для $n = 10^4$ $R_n \approx 0.5$ см. Такие состояния называются *ридберговскими*.

Из (1.22), (1.24) и (1.25) находим энергии стационарных состояний (*энергетические уровни* атома водорода):

$$E_n = -\frac{e^2}{2r_n} = -\frac{1}{2n^2}\,\frac{me^4}{\hbar^2}. \tag{1.26}$$

Энергия основного $n = 1$ состояния атома водорода равна (с обратным знаком) энергии ионизации и для водорода составляет

$$E_{\text{иониз.}} = -E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} \equiv 1\,\text{Ry} = 13.6\,\text{эВ}. \tag{1.27}$$

Иногда удобно использовать так называемые *атомные единицы* (а. е.), где принято $m = e = \hbar = 1$. В этом случае атомная единица равна 2 Ry (два Ридберга или 1 Хартри), так что энергии стационарных состояний атома водорода равны $E_n = -1/(2n^2)$ а. е.

Характерные энергии в атоме водорода малы по сравнению с массой электрона:

$$E_{\text{иониз.}} = \frac{1}{2}\, mc^2\, \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \equiv \frac{1}{2}\,\alpha^2 mc^2 \ll mc^2. \tag{1.28}$$

Здесь мы использовали безразмерную *постоянную тонкой структуры*

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.06}. \tag{1.29}$$

Поэтому в атомной физике релятивистские эффекты обычно оказываются малыми. Однако они растут для тяжёлых атомов, так как, согласно (1.21), вместо e^2 везде войдёт $Ze \cdot e = Ze^2$, где Z — заряд ядра. В формуле (1.28) α нужно будет заменить на αZ, что при больших Z может приближаться к единице. Из (1.23) и (1.24) легко оценить скорость электрона в атоме на орбите n:

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar} = c\,\frac{Z\alpha}{n}, \tag{1.30}$$

т. е. $(v/c) \ll 1$, за исключением тяжёлых атомов, и уменьшается для удалённых орбит. Заметим, что в атомной системе единиц $c = 1/\alpha \approx 137$.

Задача 1.5

Для наинизшей электронной орбиты атома водорода

а) оценить величину электрического поля ядра на орбите (в В/см);

б) оценить величину магнитного поля на ядре, создаваемого орбитальным движением электрона (в Тесла);

в) сравнить величины кулоновских и гравитационных сил между электроном и протоном.

Решение.

а) Электрическое поле на орбите можно выразить в терминах энергии основного состояния ($n = 1$):

$$\mathcal{E} = \frac{e}{a_0^2} = \frac{2|E_1|}{ea_0} = 5.14 \cdot 10^9\ \text{В/см} = 1.7 \cdot 10^7\ \text{а. е./см}, \tag{1.31}$$

где $|E_1| = 13.6$ эВ (1.27).

б) В соответствии с *законом Био — Савара* магнитное поле элемента $\mathbf{dl}$ тока I равно

$$\mathbf{B} = \frac{I}{cR^3}\,[\mathbf{dl} \times \mathbf{R}], \tag{1.32}$$

где $\mathbf{R}$ — расстояние между элементом тока и точкой измерения. Ток от электрона, вращающегося с периодом T по орбите радиусом r, равен

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}. \tag{1.33}$$

Интегрируя выражение (1.32) по этой орбите, получаем величину магнитного поля в центре:

$$B = \frac{2\pi I}{cr} = \frac{ev}{cr^2}. \tag{1.34}$$

Следовательно, для орбиты основного состояния:

$$r = a, \quad v = \frac{\hbar}{ma}, \quad B = \frac{m^2 e^7}{c\hbar^5}. \tag{1.35}$$

Используя выражение для постоянной тонкой структуры (1.29), из (1.35) получаем величину магнитного поля:

$$B = \alpha\mathcal{E} = 1.3 \cdot 10^5\,\text{Гс} = 13\,\text{Тл}. \tag{1.36}$$

в) Отношение сил равно

$$\frac{F_{\text{кулон.}}}{F_{\text{грав.}}} = \frac{e^2}{GmM} = 2.3 \times 10^{39}, \tag{1.37}$$

где

$$G = 6.67 \cdot 10^{-8}\,\text{см}^3\text{г}^{-1}\text{с}^{-2} \; - \tag{1.38}$$

гравитационная постоянная, а m и M — это массы электрона и протона соответственно.

Для будущих оценок полезно отметить, что постоянная тонкой структуры (1.29) определяет шаг в последовательности длин, служащих в качестве верстовых столбов на дороге вглубь материи. Следующая остановка после боровского радиуса (1.25) оказывается на *комптоновской длине волны*:

$$\lambda_C = \alpha a = \frac{\hbar}{mc} = 3.862 \cdot 10^{-11}\,\text{см}, \tag{1.39}$$

где числовое значение дано для массы электрона. Мы уже встречали эту длину в выражении (1.7) для эффекта Комптона. Позже в разделе 5.10 мы

увидим, что эта длина определяет наименьший размер локализации для частицы массы m, допустимый в соответствии с квантовой теорией и теорией относительности. Продвигаясь далее вглубь, мы получаем *классический радиус электрона*, который не содержит постоянной Планка:

$$r_e = \alpha\lambda_C = \alpha^2 a = \frac{e^2}{mc^2} = 2.818\cdot 10^{-13}\,\text{см}. \tag{1.40}$$

Эта величина показывает предел применимости классической электродинамики. На меньших расстояниях электростатическая энергия e^2/r в предположении классического точечного заряда начинает превышать всю массу электрона.

После нахождения набора стационарных орбит можно воспользоваться вторым постулатом Бора (1.20) и найти спектр излучения, испускаемого атомом при переходе между орбитами $n \to n'$, $n' < n$,

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}. \tag{1.41}$$

Для атома водорода выражения (1.26) и (1.41) дают:

$$\omega_{nn'} = \frac{me^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{1.42}$$

или в терминах длин волн:

$$\frac{1}{\lambda_{nn'}} = \frac{\omega_{nn'}}{2\pi c} = \frac{me^4}{4\pi c\hbar^3}\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right). \tag{1.43}$$

Мы пришли к комбинационному принципу (1.11) с предсказанием значения для константы Ридберга (1.12), которую мы обозначим здесь как R_∞:

$$R_\infty = \frac{me^4}{4\pi c\hbar^3} = 109737\,\text{см}^{-1}. \tag{1.44}$$

С классическим выражением для интенсивности излучения заряженной частицы $|dE/dt| \sim (e^2/c^3)(\text{ускорение})^2$ можно грубо оценить время жизни электрона на возбуждённой орбите, например, для перехода $(n = 2) \to$ $\to (n = 1)$. В этом случае энергия перехода $\hbar\omega_{21}$ будет излучена за время $\tau \sim (\hbar/mc^2)(1/\alpha^5)$. Так как период классического вращения по орбите $T \propto (r_2/v_2)$, то мы получим $T \sim (\hbar/mc^2)(1/\alpha^2)$. Отсюда следует, что $\tau/T \sim$ $\sim (1/\alpha^3) \sim 10^6$, т. е. возбуждённое состояние является долгоживущим или

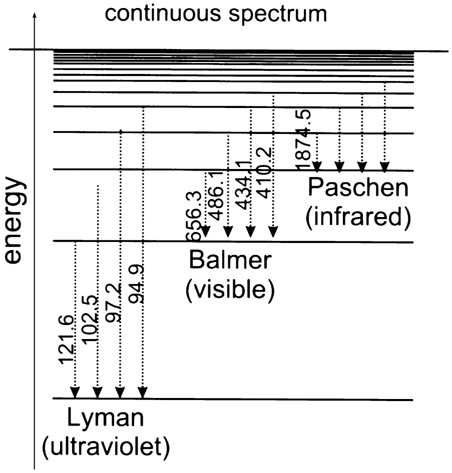

Рис. 1.7: Спектр атома по модели Бора

квазистационарным. Основное же состояние является стабильным, что противоречит классической картине.

Задача 1.6

Покажите, что различие между предсказанной постоянной Ридберга R_∞ и экспериментальным значением R_H (1.12) возникло как результат предположения о бесконечно тяжелом ядре, в то время как учёт поправок, связанных с *отдачей* ядра при движении электрона, приводит к их совпадению. Сравните атомные уровни трёх изотопов: водорода, дейтерия и трития.

Решение.

Для учёта этой поправки при описании *относительного движения* электрона и ядра вместо массы электрона m_e и ядра M следует использовать *приведённую массу*:

$$m \Rightarrow \mu = \frac{m_e M}{m_e + M}. \tag{1.45}$$

В настоящее время обсуждается возможность того, что отношение масс m_e/m_p может изменяться со временем на масштабах времени жизни вселенной. Это изменение можно попробовать обнаружить с помощью прецизионных измерений спектров удалённых (старых) звёзд.

По модели Бора, атом водорода обладает бесконечной последовательностью связанных состояний, сгущающихся к пороговому значению $E = 0$,

которое отделяет их от несвязанных состояний, соответствующих классическому *инфинитному* движению. Для энергий $E > 0$ нет аналогов постулатов Бора, которые позволяют выбрать квантованные траектории, т. е. все энергии доступны (*сплошной спектр*). На рис. 1.7 схематически представлен низколежащий энергетический спектр. Поскольку энергетические интервалы между соседними уровнями быстро убывают с номером уровня n, то все спектральные линии, отвечающие переходам из разных начальных состояний n в одно конечное состояние n', оказываются близкими и объединяются в *спектральные серии*. Исторически эти серии носят имена учёных: $n' = 1$ — *серия Лаймана*, ультрафиолетовое излучение с максимальной длиной волны 1216 $\AA$ (переход из $(n = 2)$); $n' = 2$ — *серия Бальмера*, видимый свет; серии с $(n' > 2)$ отвечают инфракрасной области спектра.

Задача 1.7

Существует много *водородоподобных* систем, к которым можно применить такой же подход. Найдите энергию основного состояния и наибольшую длину волны для «лайманоподобной» серии *позитрония* (связанного состояния электрона и *позитрона*, который является *античастицей* к электрону, имея ту же массу, но противоположный по знаку заряд $+e$); *каонного* и *пионного* мезоатомов (ядро с зарядом $+Ze$ и отрицательно заряженным каоном $m(K^-) = 494\,\text{МэВ}/c^2$ или пионом $m(\pi^-) = 140\,\text{МэВ}/c^2$ вместо электрона); мюонного атома (ядро с зарядом $+Ze$ и отрицательно заряженный мюон, который является тяжёлым аналогом электрона с массой $m(\mu^-) = 106\,\text{МэВ}/c^2$); *протония* (связанного состояния протона и антипротона).

Задача 1.8

В металлах и плазме при наличии свободных электронов заряд положительно заряженного центра (иона в плазме или примеси в твёрдом теле) экранируется за счёт перераспределения электронов. В результате электростатический потенциал от центра перестаёт быть дальнодействующим и падает по экспоненциальному закону

$$U(r) = -Ze^2\,\frac{e^{-\mu r}}{r}, \tag{1.46}$$

где μ растёт, а радиус взаимодействия (*дебаевский радиус*) $r_D = 1/\mu$ уменьшается с ростом плотности свободных электронов.

Используемый в ядерной физике похожий *потенциал Юкавы* описывает взаимодействие между нуклонами через обмен мезонов. В этом случае

вместо Ze^2 необходимо подставить константу взаимодействия f^2, а радиус $1/\mu$ заменить на комптоновскую длину волны для мезона массы M: $1/\mu = \hbar/Mc$. Покажите с помощью квантования Бора, что экспоненциально экранированный потенциал поддерживает лишь *конечное число* связанных состояний. Оцените это число в терминах параметров f, μ и массы движущейся в этом потенциале частицы. Это ограничение на число состояний объясняет постепенное исчезновение спектральных линий в плазме с ростом плотности свободных электронов.

Решение.

Из правила квантования получается, что

$$Ze^2 m\mu\left(1+\frac{1}{\mu r}\right) r^2 e^{-\mu r} = n^2\hbar^2. \tag{1.47}$$

Левая часть уравнения (1.47) экспоненциально уменьшается на больших расстояниях $\mu r \gg 1$. Поэтому для больших n решения отсутствуют и число связанных состояний конечно. Максимально допустимый радиус может быть найден из максимума левой части, который дается положительным корнем уравнения:

$$r^2 - \frac{r}{\mu} - \frac{1}{\mu^2} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad r = \frac{1+\sqrt{5}}{2\mu}. \tag{1.48}$$

Естественно, можно догадаться и без вычислений, что величина максимального радиуса орбиты должны быть порядка $r_D = 1/\mu$. Максимальное квантовое число, соответствующее числу связанных уровней в экранированном потенциале, примерно равно

$$n^2_{\text{макс.}} \approx \frac{(3+\sqrt{5})(1+\sqrt{5})}{4}\, e^{-(1+\sqrt{5})/2}\, \frac{mZe^2}{\mu\hbar^2} \approx 0.84\, \frac{r_D}{a}\, Z, \tag{1.49}$$

где $a/Z = \hbar^2/(me^2 Z)$ — боровский радиус наинизшего связанного состояния в чистом кулоновском потенциале заряда Ze. Несмотря на то что квазиклассическое квантование (1.13) обычно плохо описывает низшие связанные состояния, мы получили разумную оценку. Для очень малой величины дебаевского радиуса, $r_D < a/Z$, экранированный потенциал вообще не имеет связанных состояний, $n_{\text{макс.}} < 1$.

В случае Юкавского потенциала,

$$U(r) = -\frac{f^2}{r}\, e^{-(Mc/\hbar)r}, \tag{1.50}$$

квадрат константы связи f^2 имеет размерность [энергия·расстояние]. Обмен мезонами, судя по предыдущему результату, не создаёт связанное двухчастичное состояние, если притяжение слишком слабое: $(f^2/\hbar c) < 1.19 \times$ $\times (M/m)$, где m — приведённая масса взаимодействующих частиц. Этот результат довольно близок к точному: $f^2_{\text{крит.}}/(\hbar c) = 0.84(M/m)$, который может быть получен из численного решения квантового уравнения Шрёдингера для потенциала Юкавы.

1.7 Принцип соответствия

Постулаты Бора позволяют получить *точное* решение (1.26) для атома водорода в нерелятивистском приближении. Это удачное свойство чисто кулоновского потенциала. В общем же случае при применении того же алгоритма квантования получаются только приближённые решения. Остается также неопределённость с наличием решения для $n = 0$. Формально такое решение позволило бы частице упасть в центр потенциала ($\ell = 0$ в соответствии с (1.14)).

В дальнейшем теория Бора была уточнена и развита *А. Зоммерфельдом.* Орбитальный момент и эллиптические орбиты были согласованно включены в формализм. Это предполагает наличие дополнительных параметров для описания формы стационарной орбиты. Кроме *главного квантового числа* n, орбите приписывается *орбитальный момент* $\ell = 0, 1, ..., n-1$ и *магнитное квантовое число* m, которое описывает ориентацию орбиты в пространстве. Энергия уровня не может зависеть от ориентации орбиты, поэтому все подуровни с разными m являются *вырожденными* (имеют одну и ту же энергию). В дополнение к этому из-за специфических особенностей кулоновского потенциала при данном n энергия не зависит от ℓ. Это так называемое *случайное вырождение* имеет глубокую физическую причину и будет разобрано в главе 7 и главе 3 из второго тома. Орбиты с разными значениями ℓ и фиксированными n формируют *атомные оболочки.* Это стало базой для основного достижения *старой квантовой теории* — объяснения периодической таблицы Менделеева. Учёт релятивистских поправок позволил описать атомные спектры более подробно.

Дискретность атомных состояний была продемонстрирована в опытах *Франка* и *Герца* (1913), в которых наблюдались минимумы электронного тока через газ при таких значениях ускоряющего потенциала, которые отвечают энергиям электронов, достаточным для возбуждения дискретных уровней атома при столкновении с ним электрона. Это уже не оставило сомнений, что квантовая теория действительно описывает глубокие

свойства природы. Однако она ещё не была полностью согласованной и последовательной теорией.

Если принять классические законы движения, но наложить на них условия квантования, то следует ожидать, что при некоторых условиях модифицированная теория должна воспроизвести все классические результаты, в которых квантовые эффекты несущественны. Для науки характерно, что новое развитие не отменяет старые результаты, а лишь ограничивает область их применимости. Классическая наука (механика и электродинамика) должна стать частным предельным случаем более общей теории. Одним из основных критериев, используемым Бором, было требование, что квантовый подход к теории обязан воспроизвести правильные классические результаты. Это известный *принцип соответствия*. Несмотря на все недостатки старой квантовой теории, этот принцип выполняется. Существует промежуточная, *полуклассическая* или *квазиклассическая*, область, где предсказания квантовой теории становятся неотличимыми от предсказаний классической физики.

Рассмотрим сильно возбуждённые боровские уровни с $n \gg 1$. Радиусы боровских орбит r_n быстро растут с ростом n и достигают макроскопических размеров. Такие ридберговские орбиты используются, например, в физике мезоатомов (задача 1.7). Высокоэнергичные пионы, рождённые в результате взаимодействия элементарных частиц или в ядерных реакциях, замедляются в веществе и могут быть захвачены на одну из ридберговских орбит с большим n. Затем они опускаются до основного или одного из низших уровней, излучая каскад фотонов. На расстояниях, соответствующих большим n, можно ожидать выполнения законов классической механики. Если это так, то комбинационный принцип для излучения должен трансформироваться в классические законы.

При периодическом движении с частотой ω_0 классический заряд излучает электромагнитные волны той же частоты или кратных частот (обертоны), $\Delta n \cdot \omega_0$, где Δn — целое число. На первый взгляд здесь нет ничего общего с комбинационным принципом (1.11). Однако в квазиклассической ситуации переходы удовлетворяют условиям

$$n \gg 1, \quad n' \gg 1, \quad \frac{n - n'}{n} \equiv \frac{\Delta n}{n} \ll 1. \tag{1.51}$$

Следовательно, квантовая частота излучения (1.42) может быть аппроксимирована как

$$\omega_{nn'} = \frac{me^4}{2\hbar^3}\,\frac{n^2 - n'^2}{(nn')^2} \approx \frac{me^4}{\hbar^3 n^3}\,\Delta n. \tag{1.52}$$

Для тех же условий (1.51) классическая частота обращения на орбите равна

$$\Omega_n = \frac{v_n}{r_n} = \frac{me^4}{\hbar^3 n^3}, \tag{1.53}$$

так что излучаемые частоты в квазиклассической области действительно кратны частоте обращения:

$$\omega_{\text{излучения}} = \Delta n \cdot \Omega_n. \tag{1.54}$$

Этот частный пример подтверждает общее научное правило, что более продвинутая теория должна содержать результаты предыдущих исследований как частные случаи, реализуемые при определённых физических условиях.

Теперь мы можем обобщить этот результат для движения в любых связывающих потенциалах. Взяв производную от выражения

$$E_n = \frac{p_n^2(x)}{2m} + U(x), \tag{1.55}$$

связывающего энергию E_n и классический импульс $p_n(x)$, получим уравнение Гамильтона

$$dE_n = \frac{p_n}{m}\,dp_n = v_n dp_n. \tag{1.56}$$

Рассмотрим фазовый интеграл в пределах от точки поворота a_n до произвольной точки x внутри области действия потенциала. В квазиклассической области (1.51) это плавная функция от n. Чтобы вычислить производную интеграла по n, достаточно продифференцировать только подынтегральное выражение без дифференцирования пределов интеграла, так как подынтегральное выражение $p_n(x)$ обращается в ноль в точке поворота:

$$\int_{a_n}^{x} dx\,\frac{\partial p_n(x)}{\partial n} = \int_{a_n}^{x} dx\,\frac{\partial p_n}{\partial E_n}\,\frac{\partial E_n}{\partial n} = \Delta_n \int_{a_n}^{x} \frac{dx}{v_n} = \Delta_n t_n(x), \tag{1.57}$$

где $t_n(x)$ — длительность классического движения с энергией E_n из точки a_n в точку x, а Δ_n — расстояние между ближайшими уровнями:

$$\Delta_n = E_n - E_{n-1} \approx \frac{dE_n}{dn}. \tag{1.58}$$

Для того, чтобы найти Δ_n, продифференцируем условие квантования (1.13):

$$\pi\hbar = \frac{\partial}{\partial n}\int_{a_n}^{b_n} p_n\, dx. \tag{1.59}$$

Подобно (1.57) получаем:

$$\pi\hbar = \Delta_n \int_{a_n}^{b_n} \frac{dx}{v_n}, \tag{1.60}$$

что определяет половину полного периода движения T_n:

$$\pi\hbar = \Delta_n \frac{T_n}{2} = \Delta_n \frac{\pi}{\Omega_n}, \tag{1.61}$$

и, наконец:

$$\Delta_n = \hbar\Omega_n. \tag{1.62}$$

Для гармонического осциллятора, согласно (1.16), частота $\Omega_n = \omega$ не зависит от квантового числа n (в классической механике период не зависит от амплитуды).

Здесь мы пришли к более конкретной форме *принципа соответствия*. Расстояние между ближайшими квазиклассическими уровнями (делённое на $\hbar$) равно классической частоте периодического движения при соответствующей энергии. В каждом малом интервале квазиклассический спектр связанных состояний примерно эквидистантный, как для гармонического осциллятора с частотой ω, и плавно меняется от одного интервала энергий к другому. Как обсуждалось ранее, это необходимо для корректного перехода к классической теории излучения: частотный спектр квазиклассической системы содержит основную частоту вращения и кратные гармоники, что соответствует спектру излучения классического вибратора.

1.8 Пространственное квантование

Правило квантования не может относиться лишь к связанным состояниям в кулоновском поле, оно имеет общий характер. Так, например, должен квантоваться *магнитный момент* электрона. Действительно, классическая электронная орбита представляет собой виток с током $I = e/T$, где T — период обращения $T = 2\pi/\omega$. Такой виток обладает магнитным моментом $\mu = I\mathcal{A}/c$, где площадь эллиптической орбиты (φ — полярный угол) равна

$$\mathcal{A} = \int_0^{2\pi} d\varphi\, \frac{r^2}{2} = \frac{1}{2}\int_0^T dt\, r^2 \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{2}\int_0^T dt\, r^2\omega = \frac{1}{2m}\int_0^T \ell\, dt = \frac{\ell T}{2m}; \quad (1.63)$$

здесь ℓ — момент импульса, или *орбитальный момент*, который является интегралом движения и квантуется в соответствии с (1.14). Отсюда получаем квантование магнитного момента:

$$\mu = \frac{e}{cT}\frac{\ell T}{2m} = \frac{e\ell}{2mc} = \frac{e\hbar}{2mc} n. \quad (1.64)$$

Тем самым мы предсказываем значение *орбитального гиромагнитного отношения*:

$$g_\ell \equiv \frac{\mu}{\ell} = \frac{e}{2mc}. \quad (1.65)$$

Магнитный момент должен быть равен целому кратному элементарного магнитного момента, называемому *боровским магнетоном.* Для электрона

$$\begin{aligned} \mu = n\mu_B, \quad 1\,\mu_B = g_\ell\hbar = \frac{e\hbar}{2mc} &= 9.27\cdot 10^{-21}\,\text{эрг/Гс} = \\ &= 0.927\cdot 10^{-23}\,\text{Дж/Тл}. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Правило квантования (1.64) не содержит каких-либо параметров кулоновского поля, поэтому естественно ожидать, что такой магнитный момент связан с движением любой заряженной частицы.

Для того чтобы сделать наши утверждения более определенными, нужно учесть, что величины $\vec{\ell}$ и $\vec{\mu}$ являются *векторами.* Прямой опыт *Штерна* и *Герлаха* (1922) показал, что квантуется *проекция* этих векторов на выделенное в эксперименте направление: в случае Штерна — Герлаха направление неоднородного магнитного поля. В этом эксперименте (рис. 1.8) пучок атомов отклоняется от прямолинейного движения неоднородным магнитным полем $\mathcal{B}_z(y)$, т. е. силой $F = \mu_z \partial\mathcal{B}_z/\partial y$. Классическая электродинамика

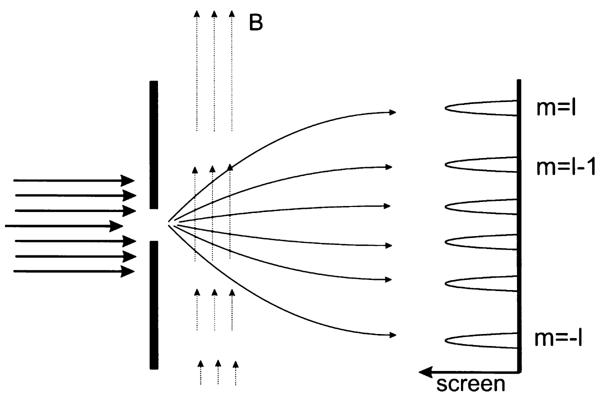

Рис. 1.8: Пространственное квантование

предсказывает распределение отклонённых атомов на регистрирующей пластине в виде широкой непрерывной полосы, отвечающей всем значениями проекции μ_z, которая непрерывно меняется от $-\mu$ до $+\mu$. Эксперимент вместо этого дает дискретное число узких полосок, расположенных симметрично относительно первоначального направления движения. Таким образом, допустимы лишь определённые значения μ_z, т. е. при фиксированном $|\vec{\mu}|$ определённые ориентации $\vec{\mu}$ и $\vec{\ell}$ по отношению к внешнему полю (*пространственное квантование*). Расщеплённые компоненты пучка отвечают всевозможным *целочисленным* значениям проекции ℓ_z в единицах $\hbar$ и меняющейся в диапазоне, ограниченном максимальной проекцией ℓ:

$$\ell_z = m\hbar, \quad m = -\ell, -\ell + 1, ..., 0, ..., \ell - 1, \ell. \tag{1.67}$$

Поэтому, если орбитальный момент атома равен $\ell\hbar$, то опыт Штерна—Герлаха должен дать расщепление на $(2\ell + 1)$ компонент с разными значениями магнитного квантовое числа m.

1.9 Спин

В соответствии с правилом (1.67) число компонент, на которые расщепляется пучок в опыте Штерна—Герлаха, должно быть *нечётным*. Однако в ряде опытов наблюдалось *чётное* число компонент, в частности, были пучки, которые расщеплялись надвое. В атомной спектроскопии также существовали примеры дублетов, которые не предсказывались теорией. *С. Гаудсмит* и *Дж. Уленбек* (1925) выдвинули гипотезу о наличии у электрона внутреннего момента импульса. Этот дополнительный момент, или

спин, $\vec{s}$ не происходит от орбитального движения, как и вращение планеты вокруг своей оси не связано с движением вокруг звезды.

Все опытные данные согласуются с полуцелым значением спина электрона $s = (1/2)\hbar$, причём пространственное квантование допускает лишь две ориентации вектора $\vec{s}$ относительно поля:

$$s_z = \pm\,\frac{\hbar}{2}. \tag{1.68}$$

Величина отклонения пучка на опыте (рис. 1.8) даёт *спиновое гиромагнитное отношение*, которое оказывается вдвое больше орбитального (1.64):

$$g_s = \frac{\mu_s}{s} = \frac{e}{mc}. \tag{1.69}$$

Поэтому магнитный момент покоящегося ($\ell = 0$) электрона опять равен боровскому магнетону

$$\mu(\ell = 0) = \mu_s = g_s s = \frac{e\hbar}{2mc} = 1\,\mu_B. \tag{1.70}$$

Элементарные частицы, формирующие ядра атомов, *нейтроны* и *протоны*, а также составляющие их *кварки* обладают таким же спином $\hbar/2$, но их гиромагнитные отношения отличаются от простого результата (1.69), потому что здесь необходимо учитывать влияние *сильных* (ядерных) взаимодействий. Соответствующая величина для магнитного момента протона, аналогичная (1.66), называется *ядерным магнетоном*:

$$\begin{aligned} 1\,\text{я.\,м.} = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 1\,\mu_B\,\frac{m_e}{m_p} = \frac{1\,\mu_B}{1836} = 5.05\cdot 10^{-24}\,\text{эрг/Гс} = \\ = 0.505\cdot 10^{-26}\,\text{Дж/Тл}. \end{aligned} \tag{1.71}$$

Однако экспериментальные значения для протона и нейтрона равны:

$$\mu_p = 2.79\,\text{я.\,м.}, \quad \mu_n = -1.91\,\text{я.\,м.} \tag{1.72}$$

Разница между ядерным магнетоном и экспериментальным значением называется *аномальным магнитным моментом*. Обратите внимание, что нейтрон электрически нейтрален, $e_n = 0$, но его магнитный момент отличен от нуля из-за ненулевого вклада от кварков и *глюонов*. Прецизионные эксперименты показывают, что и магнитный момент электрона немного отличается от значения (1.70). В отличие от протона аномальный момент

электрон довольно мал:

$$\mu_e = \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right) \mu_B, \tag{1.73}$$

где α — постоянная тонкой структуры, введенная в (1.29). Очень точные измерения также определяют ещё меньшие поправки более высоких порядков. Это отклонение объясняется *квантовой электродинамикой*, с другой стороны, значения (1.72) до сих пор не могут быть получены теоретически, хотя их отношение хорошо описывается в терминах кварковой структуры.

В общем случае момент импульса, имеющий орбитальную, спиновую или комбинированную природу, будет называться *угловым моментом*, обозначаться буквой **J** и измеряться в единицах $\hbar$. Безразмерная величина J квантуется с целым или полуцелым значениями, а проекция J_z на выбранное направление квантования может принимать $(2J + 1)$ значений, $J_z = -J, -J + 1, ..., +J$. Как будет видно в главе 1 из второго тома, такое квантование соответствует геометрическим свойствам вращения в трёхмерном пространстве. Магнитный момент системы пропорционален её угловому моменту:

$$\boldsymbol{\mu} = g\hbar\,\mathbf{J}, \tag{1.74}$$

где g — гиромагнитное отношение, специфичное для конкретной системы. Структура покоящейся системы при добавлении слабого магнитного поля $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$ остаётся неизменной, но добавляется энергия магнитного взаимодействия:

$$E_{\text{магн}} = -(\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}) = -g\hbar\mathcal{B}J_z, \tag{1.75}$$

которая расщепляет энергетические уровни покоящейся системы на $2J + 1$ равноотстоящих подуровней с разными J_z (*эффект Зеемана*, глава 9, том 2).

1.10 Волны де Бройля

Модель атома Бора и старая квантовая теория при всех их успехах не смогли решить многих проблем, особенно касающихся интенсивности излучения и строения сложных атомов. Сам рецепт квантования не имел общего характера. В значительной степени это была гениальная догадка Бора. Нужна была новая общая физическая концепция, которая легла бы в основу новой теории. Эту ситуацию можно представить в виде таблицы:

	Свет	Вещество
Классическая теория	Волновые явления (уравнения Максвелла)	Корпускулярная динамика (уравнения Ньютона при $v \ll c$ или Эйнштейна при $v \sim c$)
Квантовая теория	Корпускулярная картина (фотоны со свойствами (1.8), (1.9))	???

Место «?» в таблице заняла картина *волн де Бройля* (1923). Предположим в духе ньютоновских идей монизма природы, что *любому* эксперименту с частицами энергии E и импульса $\mathbf{p}$ соответствует некий волновой процесс с длиной волны λ и частотой ω такими, что

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}. \tag{1.76}$$

Заметьте опять, что постоянная Планка играет только роль масштабного фактора, используемого для перевода между волновым и корпускулярным языками.

В предположении (1.76) движение частиц должно сопровождаться типичными волновыми явлениями. Так, при огибании частицами преграды, имеющей размеры, которые сравнимы с длиной волны (1.76), или при отражении от периодической структуры, должна наблюдаться дифракция. В опытах *Дэвиссона* и *Джермера* (1927) пучок электронов, отражённых от специально ориентированного кристалла, дал типичную дифракционную картину, похожую на дифракцию рентгеновских лучей. *Штерн* и *др.* (1931) показали, что и более сложные образования, например атомы гелия, обнаруживают дифракцию на кристалле. Недавно интерференционные и дифракционные эффекты были продемонстрированы на *макроскопических* масштабах, даже для больших молекул, таких как фуллерены C_{60}. Во всех случаях найденная из опыта длина волны точно отвечала импульсу частицы в соответствии с (1.76).

Задача 1.9

Оценить энергию электрона в опыте по дифракции на кристалле. Найти длину и частоту волны де Бройля: для электрона со скоростью 1 см/с; для электрона с энергией $E = 100$ МэВ: для теплового нейтрона (энергия равна $3T/2$ при комнатной температуре T; здесь и далее мы будем опускать константу Больцмана и измерять температуру по энергетической шкале; 1 эВ $\approx$ 11600 К); для футбольного мяча.

Если предположить, что волновое описание является универсальным, то его можно применить к *связанным* состояниям атома (состояния финитного движения классической механики), тогда в стационарном случае мы должны получить картину *стоячих волн*. Это сразу приводит к постулату Бора (1.13): для круговой орбиты радиуса r стационарная картина возникает, если длина волны укладывается на орбите целое число раз, т. е.:

$$\lambda = \frac{2\pi r}{n}, \quad n = 1, 2, ..., \tag{1.77}$$

откуда мы отбираем радиусы $r_n = n\lambda/2\pi$ или, в соответствии с (1.76), $r_n = n\hbar/p$, а орбитальный момент $\ell = mvr_n = pr_n = n\hbar$, что совпадает с (1.14). Здесь ясно видно, что квантование возникает как следствие *граничных условий*, наложенных на волны де Бройля. Здесь можно вспомнить классическую вибрирующую струну или волны в резонаторах, где таким же образом граничные условия определяют *нормальные моды колебаний*.

Когда длины волн становятся меньше характерных размеров системы, волновые аспекты оказываются менее выраженными, угол дифракции становится маленьким и мы подходим к области применения *геометрической оптики*. Распространение волн вдоль прямых лучей аналогично движению по прямой классических свободных частиц. Такая ситуация является промежуточной между квантовой и классической механиками. Мы уже встречались с этим при обсуждении принципа соответствия.

Прежде, чем сформулировать квантово-механический формализм, полезно накопить информацию, связанную с поведением квантовых волн в различных простых ситуациях. При этом мы будем пользоваться только определением волн де Бройля и словариком соответствий между двумя языками. Этот опыт позволит нам понять операционную интерпретацию квантовых волн.

Дополнительная литература: [3, 4].

Лишь тот, кто рассматривает предметы
в их происхождении и росте, сможет
достичь их наиболее ясного понимания
Аристотель

Глава 2

Волновая функция и простейшие задачи

2.1 Свободное движение

Теперь отнесёмся к концепции волн де Бройля более серьёзно и рассмотрим распространение квантовых волн в простых ситуациях, когда «естественные» физические соображения могут заменить точное знание законов квантовой динамики. Начнём со свободного движения волны в *бесконечном пространстве*. Это крайне идеализированная картина, но она может служить предельным случаем движения в *ограниченном пространстве*, если длина волны значительно короче, чем размеры доступного объёма.

Пусть источник, находящийся бесконечно далеко, $x \to -\infty$, порождает пучок одинаковых независимых частиц массы m. Частицы движутся с импульсом p вдоль оси x. В свободном движении энергия частиц равна $E(p) = p^2/2m$ (мы можем также рассматривать и движение с релятивистскими скоростями). Согласно словарику (1.76) соответствующие квантовые волны можно представить в виде

$$\Psi(x,t) = Ae^{ikx-i\omega t}, \tag{2.1}$$

где $k = p/\hbar$ и $\omega = E/\hbar$. Это наш первый явный пример *волновой функции*, описывающей *квантовое состояние*, в данном случае свободное движение. Выбор знаков в показателе экспоненты является условным: здесь описывается волна, бегущая направо, с $k > 0$ и $\omega > 0$. Действительно, с увеличением времени t значение фазы $(kx - \omega t)$ останется тем же только при соответствующем увеличении x. Для волны, распространяющейся в произвольном направлении $\mathbf{k}$, волновая функция выглядит как

$$\Psi(\mathbf{r},t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-i\omega t}, \tag{2.2}$$

где энергия частиц,

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m}, \tag{2.3}$$

не зависит от направления распространения. Различные квантовые состояния с одной и той же энергией называются *вырожденными*. Состояние (2.2) является *плоской монохроматической (моноэнергетической)* волной, где волновой вектор $\mathbf{k}$ полностью определяет плоский волновой фронт, перпендикулярный $\mathbf{k}$ при постоянной фазе $(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$. Энергия определяется частотой или длиной волны.

Амплитуда волны A является *комплексным* числом. $A = |A|\exp(i\alpha)$, где α определяет фазу волны в начале координат, а абсолютная величина $|A|$ связана с интенсивностью волны $I = |A|^2$. Однако в данном конкретном случае амплитуда не несёт никакой информации о квантовом состоянии. Действительно, мы ввели «пучок частиц» только для того, чтобы иметь возможность повторить наш эксперимент много раз в *одинаковых условиях*. Нас же будет интересовать информация о свойствах *отдельных* частиц. Для конструирования подобных ситуаций пучок можно сделать разреженным настолько, чтобы исключить взаимодействие между частицами. Для изучения *корреляций* между двумя конкретными частицами нам придётся рассмотреть их совместную волновую функцию $\Psi(x_1, x_2, t)$, зависящую от двух переменных и представляющую собой волну не в одночастичном, а в удвоенном *конфигурационном пространстве*. Корреляции могут возникнуть из-за взаимодействия между частицами или из-за того факта, что частицы, получаемые с помощью одного и того же источника, являются *запутанными*. Сейчас же мы сосредоточимся на рассмотрении *одночастичной* динамики.

Поместим *детектор* в точку $\mathbf{r}$, чтобы зарегистрировать присутствие частицы в малом объёме d^3r вблизи выбранной точки. Для волновой функции (2.2) амплитуда $|A|$ определяет *скорость счёта* детектора. Число отсчётов в единицу времени будет пропорционально интенсивности падающей волны $|A|^2d^3r$. Бесструктурные частицы проявляются как кванты волн де Бройля, и каждое успешное событие (*срабатывание детектора*) будет фиксировать *одну* частицу целиком. В предположении, что детектор идеален, *вероятность* захвата одной частицы в данной точке есть свойство изучаемого квантового состояния. Наше состояние (2.2) является выделенным в том смысле, что

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |A|^2 = const, \tag{2.4}$$

вероятность обнаружения частицы одинакова в любой точке пространства в любой момент времени. Это следствие идеализированного образа плоской волны, имеющей бесконечные размеры как в пространстве, так и во времени. Необходимо отметить, что информация о квантовом состоянии может получаться только как результат множества повторных независимых идентичных экспериментов, так как каждое конкретное измерение волновой функции разрушает её (частица регистрируется детектором).

2.2 Плотность и поток вероятности

В общем случае волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ меняется от точки к точке в пространстве и времени, причём меняется как фаза, так и амплитуда. Это происходит даже в случае абсолютно стабильного источника, если частицы могут взаимодействовать друг с другом или с внешними полями, которые могут также быть частью измерительной аппаратуры. Абсолютное значение квадрата волновой функции интерпретируется как вероятность нахождения частицы в малом элементе объёма d^3r около заданной точки. Эта величину естественно назвать *плотностью вероятности* $\rho(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho(\mathbf{r}, t)\, d^3r \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\, d^3r. \tag{2.5}$$

Выбор коэффициента пропорциональности в выражении (2.5) по существу произволен: эту величину (если она константа) всегда можно включить в амплитуду A волновой функции. Можно сказать, что квантовое состояние описывается *лучом* в пространстве волновых функций, где *постоянный* множитель в амплитуде не имеет значения.

Если квантовое состояние соответствует *финитному* движению, то волновую функцию Ψ можно нормировать. Иными словами, мы можем выбрать не зависящий от координаты постоянный множитель таким образом, чтобы результирующая функция удовлетворяла условию:

$$\int d^3r\, |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int d^3r\, \rho(\mathbf{r}, t) = 1; \tag{2.6}$$

сходящийся интеграл определяет амплитудный множитель. В случае *нормированной* функции величина ρ становится в подлинном смысле этого слова «плотностью» вероятности. Если нормировочный интеграл (2.6) расходится, как в случае определённой во всём пространстве плоской волны (2.4), то абсолютная нормировка невозможна. Так как постоянная амплитуда A не несёт информации о квантовом состоянии, смысл имеет только *относитель-*

ная вероятность нахождения частицы в двух разных точках пространства. Фактически ненормируемые функции появляются в результате идеализаций, сделанных в целях упрощения задачи. На практике движение всегда финитно.

Плотность вероятности $\rho(\mathbf{r}, t)$ в общем случае зависит от времени. Однако мы можем рассмотреть систему, в которой частицы не создаются и не уничтожаются. Это может быть стабильный атом или частицы в ловушке. Тогда вероятность $w_V(t)$ нахождения частицы внутри фиксированного объёма V может меняться со временем только потому, что частица попадает внутрь объёма или уходит из него. Эта вероятность определяется интегралом от ρ по объёму V:

$$w_V(t) = \int_V d^3r\, \rho(\mathbf{r}, t), \tag{2.7}$$

и она будет меняться, если существует *плотность потока вероятности* $\mathbf{j}$. Эта плотность потока, как плотность тока жидкости в гидродинамике или плотность электрического тока в электродинамике, есть произведение плотности текущей субстанции, массы или заряда в этих примерах, а в квантовой механике плотности вероятности, на локальную скорость $\mathbf{v}$,

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}. \tag{2.8}$$

Изменение вероятности (2.7) со временем обусловлено потоком вероятности через поверхность S объёма V:

$$\frac{\partial}{\partial t} w_V(t) = -\oint (d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}). \tag{2.9}$$

Знак минус в правой части выражения (2.9) соответствует тому, что положительное направление тока отвечает истечению из объёма, вследствие чего вероятность нахождения частицы внутри объёма уменьшается. Вектор элемента поверхности $d\mathbf{S} \equiv dS\,\mathbf{n}$ в каждой точке направлен вдоль внешней нормали $\mathbf{n}$ к поверхности.

Интеграл по поверхности можно преобразовать в интеграл по объёму:

$$\oint (d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}) = \int_V d^3r\, \mathrm{d}iv\, \mathbf{j}. \tag{2.10}$$

В пределе бесконечно малого объёма вокруг точки $\mathbf{r}$ из уравнений (2.7), (2.9) и (2.10) следует важное *уравнение непрерывности*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{d}iv\,\mathbf{j} = 0. \tag{2.11}$$

Как и в других приложениях, *уравнение непрерывности* является локальным выражением *закона сохранения*. В гидродинамике сохраняется полная масса жидкости, а в электродинамике сохраняется полный электрический заряд. Если в системе нет источников или стоков, то в квантовой механике сохраняется полная вероятность и частицам остаётся только возможность мигрировать в пространстве, но не появляться или исчезать. В случае финитного движения ток на бесконечно больших расстояниях отсутствует. Если увеличить тестируемый объём V, чтобы он включил в себя всю систему, так что поток через поверхность будет равен нулю, мы получим

$$w_{V\to\infty} \equiv \int d^3r\,\rho = \mathrm{c}onst, \tag{2.12}$$

т. е. полная вероятность сохраняется. Мы знаем из (2.6), что в случае финитного движения мы можем нормировать волновую функцию так, чтобы полная вероятность равнялась 1. Таким образом, можно утверждать, что нормировка не будет меняться во времени.

В пределе бесконечного объёма и удалённого источника по примеру (2.2) существует поток через бесконечно большую поверхность. Но локально уравнение непрерывности (2.11) остаётся справедливым в любой точке $\mathbf{r}$. В конкретном примере плоской монохроматической волны мы должны идентифицировать скорость в определении потока со скоростью частицы $\mathbf{p}/m$, поэтому:

$$\rho = |\Psi|^2 = |A|^2, \quad \mathbf{j} = \rho\mathbf{v} = |A|^2\,\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}. \tag{2.13}$$

Здесь обе величины ρ and $\mathbf{j}$ постоянны во всём пространстве и времени, так что уравнение непрерывности заведомо выполнено. Плотность постоянна из-за нашей аппроксимации волны, равномерно размазанной по всему объёму. В отличие от простого потока (2.13) в более сложных случаях только конкретная динамика квантовой системы позволит определить вид плотности потока вероятности, который будет удовлетворять уравнению непрерывности.

Отметим важное следствие простого соотношения между энергией системы и частотой волны де Бройля. Для любой волновой функции с опре-

делённой сохраняющейся энергией мы будем иметь волновую функцию в *монохроматическом* виде:

$$\Psi(q,t) = \psi(q)e^{-(\imath/\hbar)Et}, \tag{2.14}$$

где q — все переменные, имеющие непосредственное отношение к системе (пространственные и внутренние переменные частиц). Следовательно, плотность вероятности в q-пространстве

$$\rho(q,t) = |\Psi(q,t)|^2 = |\psi(q)|^2 \tag{2.15}$$

не зависит от времени. Состояние с определённой энергией называется *стационарным*. В этом случае уравнение непрерывности упрощается:

$$\mathrm{d}iv\,\mathbf{j} = 0. \tag{2.16}$$

2.3 Принцип суперпозиции и неопределённость

Плоская волна (2.2) даёт нереалистичную картину бесконечного пространства, заполненного частицами, которые поставляются стационарным удалённым источником. В реальности геометрия любого эксперимента ограничена. Коллиматоры, электростатические и магнитные линзы и другие устройства формируют пучок частиц после многочисленных преобразований — преломлений, отражений от стенок и т. д. Каждое подобное взаимодействие изменяет импульс частиц, по крайней мере по направлению. В результате волновая функция в каждой точке является *суперпозицией* первичной и всех вторичных волн. Предполагается, что это может быть выражено простым сложением всех этих волн с их волновыми векторами и амплитудами:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n A_n e^{i(\mathbf{k}_n\cdot\mathbf{r})} e^{-i\omega t}. \tag{2.17}$$

Здесь мы предполагаем, что все вторичные волны имеют одну и ту же энергию, так что итоговая картина, которая по-прежнему представляет *стационарное* состояние, имеет не такое «скучное» пространственное распределение: помимо *некогерентной* суммы интенсивностей отдельных компонент, присутствует и их *интерференция*:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_n |A_n|^2 + 2\,\mathrm{Re} \sum_{\text{пары}\, n\neq n'} A^*_{n'} A_n e^{i(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_{n'})\cdot\mathbf{r}}. \tag{2.18}$$

Теперь плотность вероятности уже *неоднородна* в пространстве и в ней проявляются максимумы и минимумы. Вероятнее всего обнаружить частицу вблизи максимумов, и можно сказать, что экспериментальная установка, *локализуя* частицы в некоторых областях, уменьшает вероятность их нахождения в других местах. В случае суперпозиции волн с разными частотами ω_n итоговая картина будет *нестационарной*, демонстрируя биения во времени.

Неопределённость в импульсе — это цена, которую приходится платить за локализацию в пространстве. Так как волновая функция (2.17) содержит разные плоские волны, то можно ожидать, что эксперименты по измерению импульса будут давать разные результаты. Развивая предыдущие рассуждения, можно интерпретировать амплитуды A_n входящих в суперпозицию волн, как их *амплитуды вероятности*, так что относительные вероятности w_n для различных значений $\mathbf{k}_n$ пропорциональны $|A_n|^2$. Для конечной суммы $|A_n|^2$ получаем абсолютную вероятность:

$$w_n = \frac{|A_n|^2}{\sum_n |A_n|^2}, \quad \sum_n w_n = 1. \tag{2.19}$$

Более подробная информация о возможном положении частицы получается за счёт утери информации об импульсе. Это наша первая встреча с так называемым *принципом неопределённости*. Необходимо подчеркнуть, что такая неопределённость вытекает не из недостатков измерительных приборов, а из самой сути волновой механики.

2.4 Потенциальная стенка

В качестве первого примера рассмотрим в деталях отражение квантовой волны от сильного потенциального поля. Для простоты возьмём одномерную волну (2.1) и возведём на её пути *непроницаемую стенку* (рис. 2.1), приложив бесконечно большой потенциал отталкивания:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ \infty, & x \geqslant 0. \end{cases} \tag{2.20}$$

В этом случае вероятность обнаружения частицы в правой части пространства $x > 0$ должна быть равна нулю. В предположении *непрерывности* волновой функции $\Psi(x, t)$ рассматриваем движение только слева $x < 0$

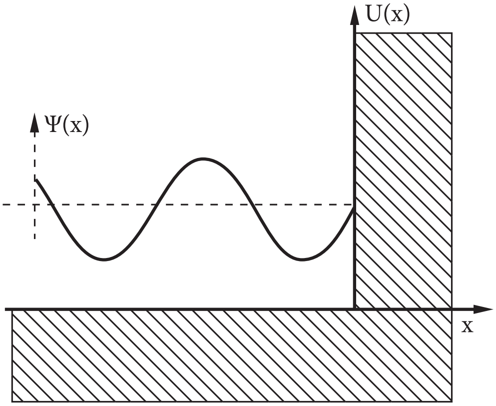

Рис. 2.1: Стоячая волна с узлом на непроницаемой барьере

с *граничным условием*:

$$\Psi(0, t) = 0. \tag{2.21}$$

В стационарных условиях энергия сохраняется и зависимость волновой функции от времени по-прежнему является монохроматической:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-(i/\hbar)Et}, \quad \psi(0) = 0, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \tag{2.22}$$

где $k > 0$ — волновой вектор волны $A\exp(ikx)$, приходящей от удалённого источника слева и формирующей падающий поток (2.13).

Условие $\psi(0) = 0$ не может быть удовлетворено с помощью одной падающей волны. Очевидно, что присутствие барьера создаёт *отражённую* волну. Чтобы не нарушать стационарность (энергия E постоянна (2.22)), вторичная волна должна иметь волновой вектор k' той же самой величины (здесь используется вырождение свободного движения по направлению). В одномерном случае единственно возможным вариантом является $k' = -k$, что соответствует отражению от стенки. Таким образом, решение является суперпозицией падающей и отражённой волн:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{2.23}$$

Граничное условие на барьере $x = 0$ (2.21) определяет амплитуду отражённой волны $B = -A$, и волновая функция может быть записана в виде

$$\psi(x) = 2iA\sin(kx). \tag{2.24}$$

Это *стоячая волна* с распределением вероятности

$$\rho(x) = 4|A|^2\sin^2(kx), \tag{2.25}$$

которая имеет *узлы* в точках $x = n\pi/k$ для целых n и *пучности* между ними (рис. 2.1).

Как уже обсуждалось, локализация частицы достигается ценой неопределённости в импульсе, в данном случае из-за наличия отражённой волны. Заметим, что интенсивность в максимумах теперь в четыре раза выше, чем интенсивность падающей волны. Волновая функция (2.24) всё ещё ненормируема, но *относительная вероятность* для различных значений координаты хорошо определена. Что касается импульса, то две компоненты с k и $-k$ имеют равные вероятности обнаружения. Однако если детектор срабатывает только при определенном направлении импульса, например вправо, то можно выделить компоненту падающей волны и измерить интенсивность $|A|^2$ без интерференции. В этом случае мы выделяем только одну компоненту полной волновой функции (2.24). Выбор конкретного эксперимента разрушает когерентность суперпозиции и преобразует состояние обратно в падающую волну, которая в отсутствие отражённой волны не является стационарным состоянием.

Уравнение непрерывности (2.16) в одномерном стационарном состоянии сводится к

$$\frac{dj}{dx} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad j = \text{const}. \tag{2.26}$$

Так как за барьером поток $j = 0$, то он должен быть равным нулю везде. В самом деле, падающий j_i и отражённый j_r потоки сокращаются:

$$j_i = |A|^2\,\frac{\hbar k}{m}, \quad j_r = |B|^2\,\frac{\hbar k'}{m} = -j_i. \tag{2.27}$$

Задача 2.1

Рассмотрите трехмерное движение с непроницаемой стенкой в плоскости $x = 0$. Получите *закон Снеллиуса* для ненулевого угла α между волновым вектором падающей волны и нормалью к стенке.

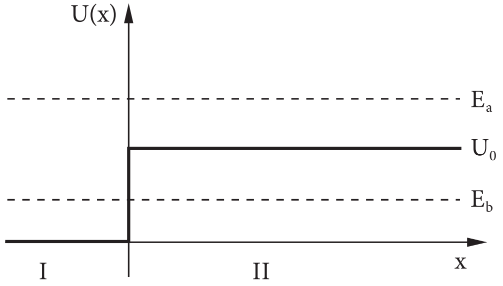

Рис. 2.2: Потенциальный барьер конечной высоты

2.5 Потенциальный барьер

Здесь мы разберём более реалистичный пример с барьером *конечной высоты*. Предположим, например, что электрон с кинетической энергией E свободно движется слева $(x < 0)$ и при $x = 0$ испытывает внезапное резкое повышение потенциала до конечной величины U_0, как на рис. 2.2, где варианты (E_a) и (E_b) соответствуют значению энергии выше или ниже высоты барьера. Путь к решению определяется двумя особенностями задачи: в стационарной ситуации энергия E сохраняется, и поток j постоянен.

Рассмотрим вариант, когда $E > U_0$ (рис. 2.2, случай E_a). В этом случае классическая частица с начальным импульсом k преодолела бы барьер и прошла бы в правую область с уменьшенным импульсом k', величина которого дается сохранением энергии:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + U_0 \quad \Rightarrow \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} < k. \tag{2.28}$$

Знак перед квадратным корнем определяется тем, что частица летит вправо. Тогда справа от барьера волновой вектор и скорость уменьшаются (2.13) по сравнению с тем, что было слева. Недостающая часть потока указывает на наличие волны, распространяющейся влево. Барьер приводит к возникновению отражённой волны, даже если $E > U_0$. *Надбарьерное отражение* — это чисто неклассическое явление.

Решение для случая $E > U_0$ является суперпозицией падающей и отражённой волн слева от барьера:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0, \tag{2.29}$$

и прошедшей волны,

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}, \quad x > 0, \tag{2.30}$$

справа от барьера. В выражении (2.30) отсутствует распространяющаяся влево волна, так как справа нет изменения потенциала, которое смогло бы вызвать отражение. Решения по обе стороны от барьера должны быть сшиты. Примем, что и волновая функция $\psi(x)$, и её производная $(d\psi/dx)_{x=0}$ *непрерывны* в точке барьера. Позже будет продемонстрировано, что это гарантирует непрерывность потока. *Условия сшивки* таковы:

$$A + B = C, \quad k(A - B) = k'C. \tag{2.31}$$

Эти условия определяют амплитуды отражённой, B, и прошедшей, C, волн в зависимости от произвольной амплитуды падающей волны:

$$B = \frac{k - k'}{k + k'}\,A, \quad C = \frac{2k}{k + k'}\,A. \tag{2.32}$$

Для контроля проверим, что в отсутствие барьера, $k' = k$, волна распространяется без изменений: $C = A$ и $B = 0$. Баланс между падающей, отражённой и прошедшей частями потока,

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}\,|A|^2, \quad j_r = \frac{\hbar(-k)}{m}\,|B|^2, \quad j_t = \frac{\hbar k'}{m}\,|C|^2, \tag{2.33}$$

выполняется:

$$j_i + j_r = \frac{\hbar}{m}\,\frac{4k^2k'}{(k + k')^2}\,|A|^2 = j_t. \tag{2.34}$$

Обычно вводятся коэффициенты *отражения* и *прохождения*, которые не зависят от произвольного значения начальной интенсивности:

$$R = \frac{|j_r|}{j_i}, \quad T = \frac{j_t}{j_i}. \tag{2.35}$$

Тогда закон сохранения вероятности (2.34) можно записать в виде

$$R + T = 1. \tag{2.36}$$

Задача 2.2

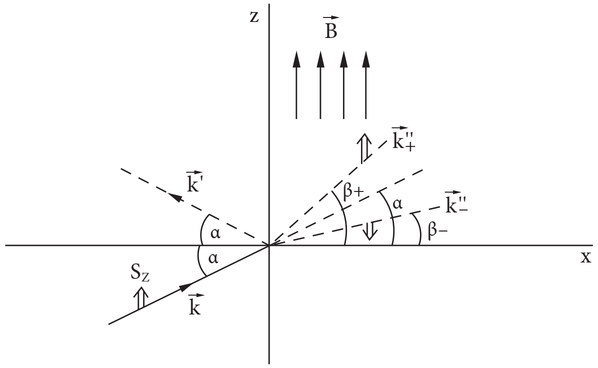

Рис. 2.3: Нейтронное магнитное зеркало

Покажите, что для потенциала на рис. 2.2, вариант E_a, коэффициенты отражения и прохождения будут такими же для волны, падающей справа.

Закон сохранения энергии должен учитывать все виды энергии, включая внутренние степени свободы частицы. В следующем примере из нейтронной физики у нас кроме кинетической энергии есть взаимодействие спина с магнитным полем $-gBs_z$ (1.75), где g — спиновое гиромагнитное отношение, определяемое в формуле (1.74) через экспериментальное значение магнитного момента нейтрона (1.72), а проекция спина s_z может принимать два значения $\pm 1/2$ в единицах $\hbar$.

Задача 2.3

Магнитное зеркало (рис. 2.3). Плоскость $x = 0$ разделяет области $x < 0$ без магнитного поля и $x > 0$ с однородным магнитном полем B, направленным по оси z. Монохроматический пучок нейтронов падает из пространства без поля с импульсом p в плоскости xz. Угол падения (между $\mathbf{p}$ и осью x) равен α. Найти углы отражения и преломления для нейтронов со спином, направленным по и против оси z. Рассчитать коэффициент отражения для обеих поляризаций спина.

Решение.

Стационарное состояние с энергией E описывается волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp[-(i/\hbar)Et]$ (2.14). В полупространстве $x < 0$ координатную волновую функцию можно записать в виде суперпозиции падающей и отражённой волн:

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + Be^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r})}, \tag{2.37}$$

где $k^2 = k'^2 = 2mE/\hbar^2$. В отсутствие магнитного поля энергия не зависит от направления спина. Поле B при $x > 0$ снимает вырождение состояний с проекциями спина $\pm 1/2$, и эти состояния приобретают различную магнитную энергию (1.75):

$$-(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = -g(\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}) = \mp \frac{g\hbar}{2} B \equiv \mp \mu B, \tag{2.38}$$

где $\mu = -1.91$ я. м. — экспериментальный магнитный момент нейтрона, (1.72). В полупространстве $x > 0$ есть только преломленная волна:

$$\psi(\mathbf{r}) = Ce^{i(\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r})}, \tag{2.39}$$

где волновой вектор различен для двух разных поляризаций:

$$\hbar^2 k''^2 = 2m(E \pm \mu B). \tag{2.40}$$

Условия сшивки в плоскости $x = 0$ требуют сохранение z-компоненты импульса $k_z = k'_z = k''_z$, в то время как

$$k'_x = -k_x, \quad k''_x = k_x \sqrt{1 \pm \frac{2m\mu B}{\hbar^2 k_x^2}} \equiv \gamma_\pm k_x. \tag{2.41}$$

Так как $\mu < 0$, то угол преломления β таков, что

$$\tan \beta = \frac{k_z}{k''_x} \tag{2.42}$$

и $\beta(s_z = +1/2) > \alpha > \beta(s_z = -1/2)$. Подобно (2.32),

$$B = \frac{k_x - k''_x}{k_x + k''_x} A, \quad C = \frac{2k_x}{k_x + k''_x} A \tag{2.43}$$

и коэффициенты отражения для двух возможных поляризаций равны

$$R_\pm = \left(\frac{1 - \gamma_\pm}{1 + \gamma_\pm} \right)^2. \tag{2.44}$$

Для тепловых нейтронов (кинетическая энергия 1/40 эВ, длина волны 1.8 Å) и магнитного поля величиной 1 Тл коэффициент отражения (2.44) приближается к 1 % при угле падения близком к $\pi/2$, $\cos^2 \alpha \approx 10^{-5}$. Заметим, что для одной из поляризаций в принципе возможно *полное внутреннее отра-*

жение, хотя на практике это реализуется только в случае *ультрахолодных нейтронов*. Потенциальная энергия в среде (в данном случае — магнитного происхождения) играет ту же роль, что и *показатель преломления* для распространения света.

2.6 Проникновение под барьер

Вернёмся к барьеру (рис. 2.2) и рассмотрим движение слева с энергией E ниже высоты барьера U_0 (вариант b). Это можно рассматривать как модель металла с работой выхода $W = U_0$, если электрон поглощает фотон с энергией $\hbar\omega$, которой недостаточно для фотоэффекта (1.5).

Из набранного опыта нам известно, что слева от барьера у нас есть падающая волна вместе с отражённой волной и волновая функция определяется выражением (2.29). Классические частицы на границе $x = 0$ были бы отражены. Однако здесь имеет место новое явление: волна частично *проникает* под барьер, что абсолютно запрещено в классической механике. Формально вычисленный волновой вектор слева $x > 0$ является *мнимым*:

$$k' = \pm\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\,(E - U_0)} = \pm i\kappa, \tag{2.45}$$

где вещественная величина $\kappa > 0$ определяется как

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\,(U_0 - E)}. \tag{2.46}$$

Волновая функция в *классически запрещённой* области $x > 0$ имеет вид $\exp(\pm\kappa x)$. Нет никаких физических причин для бесконечного роста интенсивности за барьером, поэтому физическим является только *экспоненциально затухающее* решение:

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x}, \quad x > 0. \tag{2.47}$$

Таким образом, по аналогии с оптикой в случае полного внутреннего отражения волна проникает в классически запрещённую область (электроны с энергией, недостаточной для вылета из металла, могут немного выглянуть наружу) и *глубина проникновения* может быть оценена как

$$l \simeq \frac{1}{\kappa}. \tag{2.48}$$

Можно сшить решения (2.29) и (2.47) таким же образом, как и в случае надбарьерного движения. Мы можем просто использовать решение (2.32) с подстановкой $k' = i\kappa$, чтобы получить

$$B = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} A, \quad C = \frac{2k}{k + i\kappa} A. \tag{2.49}$$

Важно, что $|B|^2 = |A|^2$, т. е. интенсивности отражённой и падающей волн равны и $j_r = -j_i$. Отсюда следует, что $R = 1$ и поток в классически запрещённой области отсутствует, даже если статическая плотность вероятности под барьером не обращается в нуль.

В пределе очень высокого барьера $U_0 \gg E$ коэффициент $\kappa \to \infty$, глубина проникновения становится очень малой, $l \to 0$, а амплитуда проникшей под барьер волновой функции $C \to 0$. При непрерывном стремлении к пределу непроницаемой стенки подтверждается граничное условие (2.21), хотя в этом пределе больше не выполняется условие непрерывности производной $d\psi/dx$, которая автоматически обращается в нуль сразу за стенкой. И волновая функция, и её производная будут непрерывными, если заменить потенциальную стенку на более приближённый к реальности потенциал, который растёт от 0 до U_0 очень быстро, но *непрерывно*. Приближение вертикального барьера имеет смысл, если длина волны частицы намного больше, чем ширина области, где потенциал возрастает. В случае противоположного предела с энергией, почти равной высоте барьера, коэффициент κ мал, а глубина проникновения в классически запрещённую область может быть очень большой. Подобное *квантовое гало* наблюдается в слабо связанных ядрах (раздел 3.5).

2.7 Туннелирование

В разделе 2.6 мы рассмотрели проникновение квантовой волны под барьер, который при конечной высоте имел бесконечную протяжённость. Теперь предположим, что энергия всё ещё ниже, чем высота барьера, в то время как ширина барьера *конечна* в пределах от $x = 0$ до $x = a > 0$, (рис. 2.4). Это может быть моделью для двух кусков металла, разделённых конечным слоем изолятора.

Разница по сравнению со случаем E_b (рис. 2.2) только в конечной протяжённости барьера. Волновая функция слева, $x < 0$, всё ещё имеет ту же форму (2.29). Однако в отличие от необходимого выбора решения, сделанного в (2.47) для бесконечно длинного барьера, здесь нельзя игнорировать возможность существования обоих знаков для мнимого «импульса»

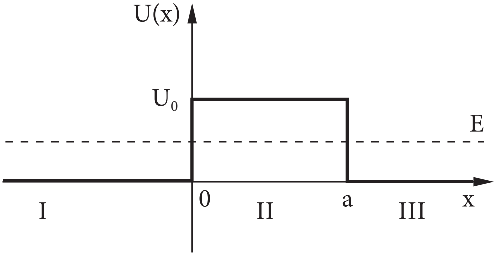

Рис. 2.4: Барьер конечной ширины

κ. Экспоненциально растущее вдоль оси x решение не запрещено, так как длина, возможная для его роста, конечна и значения на концах интервала являются конечными. Поэтому решение в подбарьерной области между двумя стенками имеет вид

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad 0 < x < a. \tag{2.50}$$

За барьером волновой вектор снова становится вещественным и равным своему исходному значению k (если потенциалы справа и слева от барьера находятся на одном уровне). За барьером может существовать только распространяющаяся вправо волна:

$$\psi(x) = Fe^{ikx}, \quad x > a. \tag{2.51}$$

Сшивка волновых функций на двух границах $x = 0$ и $x = a$ показывает, что коэффициент F не равен нулю. Это означает, что волна может *туннелировать* через классически запрещённые области *конечных* размеров.

Задача 2.4

Выполните сшивку и найдите коэффициенты прохождения $T(E)$ и отражения $R(E)$ для барьера на рис. 2.4. Покажите, что в пределе малого коэффициента прохождения величина амплитуды волны D, экспоненциально растущей под барьером (2.50), тоже подавлена.

Решение.

Предположим, что $A = 1$, тогда амплитуды различных частей волновой функции равны:

$$B = \frac{(k^2 + \kappa^2)\sinh(\kappa a)}{(k^2 - \kappa^2)\sinh(\kappa a) + i2k\kappa\cosh(\kappa a)}, \tag{2.52}$$

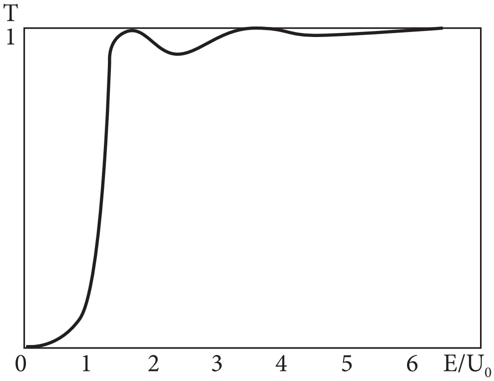

Рис. 2.5: Вероятность прохождения (уравнение (2.55)) в зависимости от энергии

$$C = \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) \frac{e^{\kappa a}}{2\cosh(\kappa a)}, \quad D = \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) \frac{e^{-\kappa a}}{2\cosh(\kappa a)}, \tag{2.53}$$

$$F = e^{-ika} \frac{2k\kappa}{2k\kappa \cosh(\kappa a) + i(\kappa^2 - k^2)\sinh(\kappa a)}. \tag{2.54}$$

Коэффициент прохождения зависит от энергии (рис. 2.5):

$$T(E) = |F|^2 = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2(\kappa a)}. \tag{2.55}$$

Для низких энергий, $E \ll U_0$, или/и широкого барьера, $\kappa a \gg 1$, $\sinh(\kappa a) \approx \approx \cosh(\kappa a) \approx (1/2)\exp(\kappa a) \gg 1$, коэффициент прохождения *экспоненциально подавлен*:

$$T(E) \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a}. \tag{2.56}$$

Амплитуда растущей под барьером экспоненты подавлена таким же образом:

$$D \propto e^{-2\kappa a}. \tag{2.57}$$

На выходе за пределы барьера оба члена в уравнения (2.50) имеют один и тот же порядок величины, $\sim \exp(-\kappa a)$. Из-за надбарьерного отражения коэффициент прохождения не достигает предела в 1 при энергии,

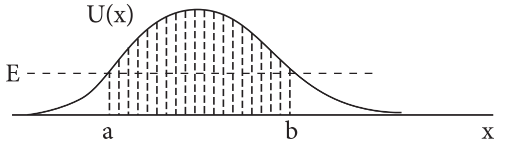

Рис. 2.6: Оценка коэффициента прохождения

стремящейся к величине барьера $E \to U_0$:

$$T(E \to U_0) = \frac{1}{1 + (U_0 m a^2/2\hbar^2)} < 1. \tag{2.58}$$

Коэффициент прохождения приближается к 1 при высоких энергиях, что показано на рис. 2.5.

Множитель перед экспонентой в коэффициенте прохождения слабо зависит от энергии (2.56), в то время как зависимость самой экспоненты является определяющей. Экспоненциальный фактор резко падает с ростом массы частицы (сравните вероятности туннелирования для электрона и протона). Мы можем воспользоваться этой драматической зависимостью, чтобы *оценить* вероятность прохождения потенциального барьера произвольной формы (рис. 2.6). Здесь будем считать, что потенциал барьера $U(x)$ является гладкой функцией координаты.

Аппроксимируем имеющийся потенциал последовательностью прямоугольников, разделяя барьер между классическими *точками поворота* a и b, где $U(a) = U(b) = E$, на мелкие полоски шириной $(\Delta x)_i$ и предполагая, что внутри каждого кусочка потенциал можно заменить на соответствующее среднее значение U_i. Это можно сделать, если потенциал является достаточно гладким. Тогда каждый короткий кусочек в тоже самое время может быть достаточно длинным, чтобы $\kappa_i(\Delta x)_i \gg 1$, где κ_i — мнимая часть волнового вектора (2.46) для конкретного U_i. Полная вероятность прохождения может быть оценена как произведение всех последовательных вероятностей прохождения через кусочные барьерчики. Используя (2.56) и игнорируя множитель при экспоненте, который слабо меняется по сравнению с самой экспонентой, получаем:

$$T \approx \prod_i T_i = \prod_i e^{-2\kappa_i(\Delta x)_i} = e^{-2\sum[\kappa_i(\Delta x)_i]} \approx \exp\left[-2\int_a^b dx\,\kappa(x)\right], \tag{2.59}$$

где

$$\kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[U(x) - E]} \quad - \tag{2.60}$$

локальный мнимый волновой вектор, $\kappa(x) = |k(x)| = |p(x)|/\hbar$. В разделе 1.5 уже упоминалось, что $\int (p/\hbar)dx$ измеряет классическое действие вдоль орбиты в единицах $\hbar$. Видно, что вероятность туннелирования определяется *мнимой* частью классического действия вдоль *классически запрещённой* «траектории».

Так как экспонента (2.59) очень чувствительна к малейшим изменениям параметров и может изменяться на порядки, то именно она и определяет порядок полного коэффициента прохождения. Оценка (2.60) является удовлетворительной для многих практических ситуаций. Более того, этот результат подтверждается в более точном квазиклассическом подходе (глава 15). Аргументы против использования такой оценки могут быть основаны на том, что мы просто перемножили *вероятности* частичного туннелирования. В духе волновой механики необходимо было бы учесть многочисленные промежуточные отражения волны от всех искусственных границ и учесть интерференции всевозможных *амплитуд*. Однако в нашем случае экспоненциально подавленного прохождения любое отражение подавляется дополнительным множителем $\exp(-2\kappa\Delta x)$. Вклад отражённых волн будет много меньше, чем у компоненты, прошедшей без отражений.

Задача 2.5

Холодная эмиссия. Электрическое поле $\mathcal{E}$, направленное вдоль оси x перпендикулярно поверхности металла, может *вытягивать* электроны через поверхностный барьер (рис. 2.7). Оценить вероятность электронной эмиссии.

Решение.

Мнимый подбарьерный импульс равен

$$\kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left[-e\mathcal{E}x - (-\varepsilon)\right]}, \tag{2.61}$$

где $E = -\varepsilon$. Вероятность туннелирования оценивается как экспонента (2.59) от интеграла, взятого в пределах между классическими точками поворота $a = 0$ и $b = \varepsilon/e\mathcal{E}$. Знак перед полем гарантирует, что $e\mathcal{E} > 0$. В результате

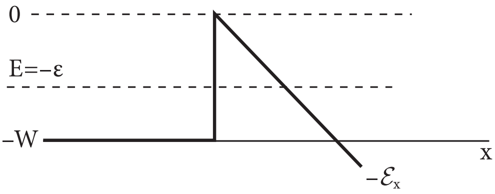

Рис. 2.7: Электронная эмиссия из металла, индуцированная электрическим полем

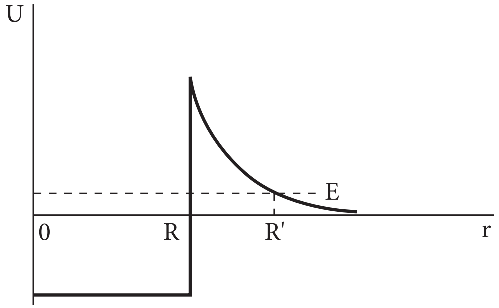

Рис. 2.8: Ядерный + кулоновский потенциал для альфа-распада

получаем

$$T \approx \exp\left[-\frac{4}{3}\,\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e\mathcal{E}}\,\varepsilon^{3/2}\right]. \tag{2.62}$$

Показатель экспоненты по порядку величины даётся мнимой фазой $-\varepsilon\tau/\hbar$, которая приобретается волной, прошедшей во *мнимом времени* $\tau \sim b/|v| = (\varepsilon/e\mathcal{E})/\sqrt{2m/\varepsilon}$. Наша оценка справедлива, если итоговый коэффициент прохождения мал, $T \ll 1$. Для энергии электронов $\varepsilon \sim 2$ эВ в случае очень сильного электрического поля ~ 10 МэВ/см, $T \sim 3 \cdot 10^{-9}$.

Задача 2.6

Альфа-распад. Альфа-частица является чрезвычайно сильно связанным ядром гелия ^{4}He, которое состоит из двух протонов и двух нейтронов. Многие сложные ядра внутренне неустойчивы по отношению к формированию и испусканию альфа-частиц. Тем не менее, чтобы вылететь из неустойчивого ядра, альфа-частица должна преодолеть *кулоновский барьер* (рис. 2.8). Возьмите в качестве приближенного ядерного потенциала ядра-остатка прямоугольную яму с непроницаемой стенкой в начале координат $r = 0$ и радиусом ядра R. Оцените вероятность альфа-распада через кулонов-

ский барьер. Подобные оценки могут быть использованы для протонных и двухпротонных распадов или *кластерной радиоактивности* с испусканием тяжёлых заряженных фрагментов ядра.

Решение.

Экспоненциальная оценка (2.59) дается интегралом

$$T \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_R^{R'} dr\sqrt{2m\left(\frac{\xi}{r}-E\right)}\right], \tag{2.63}$$

где m — *приведённая масса* двух конечных ядер, $\xi = Z_1 Z_2 e^2$, $Z_1 = 2$ для альфа-распада, тогда $Z_2 = Z - 2$, где Z — заряд родительского ядра. Аналогичная оценка используется для оценки *деления ядра* на два фрагмента с $Z_1 + Z_2 = Z$. Вычисляя интеграл (2.63) с точкой остановки $R' = \xi/E$, получаем

$$T \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\,\xi\left[\cos^{-1}\gamma - \gamma\sqrt{1-\gamma^2}\right]\right\}, \tag{2.64}$$

где $\gamma = \sqrt{ER/\xi} = \sqrt{R/R'}$. Для не слишком большой энергии E вылетающей альфа-частицы точка выхода R' находится довольно далеко от ядра $R' \gg R$, поэтому обычно $\gamma \ll 1$, $\cos^{-1}\gamma \approx \pi/2$ и главный экспоненциальный член экспоненты равен

$$T \approx \exp\left[-\frac{\pi\xi}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\right]. \tag{2.65}$$

Имея после туннелирования нулевую скорость, альфа-частица ускоряется из-за кулоновского отталкивания и приобретает на бесконечности скорость $v = \sqrt{2E/m}$. Обычно результат (2.65) выражается в терминах этой скорости и *параметра Зоммерфельда* η:

$$T \approx e^{-(2\pi\xi/\hbar v)} = e^{-2\pi\eta}, \quad \eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}. \tag{2.66}$$

Эти рассуждения справедливы для $\eta \gg 1$.

То же выражение для вероятности прохождения может быть использовано для оценки противоположных процессов: ядерного синтеза и других ядерных реакций, которые происходят после того, как внешняя частица, преодолев кулоновское отталкивание, проникает внутрь ядра. В частно-

сти, это важно для реакций термоядерного синтеза, таких как слияния двух дейтронов и других реакций, протекающих внутри звёзд. Повышение температуры имеет решающее значение для повышения вероятности туннелирования из-за очень чувствительной экспоненциальной зависимости вероятности от энергии.

И жили они на дне колодца…
Льюис Кэрролл

Глава 3

Связанные состояния

3.1 Потенциальный ящик

Мы уже обсудили простейший случай *инфинитного* движения как минимум с одной стороны, в кусочно-постоянных потенциалах. Теперь обратимся к случаю *запертой* волны. Здесь граничные условия приводят к *связанным* состояниям *дискретного* энергетического спектра. Для начала ограничим одномерное движение, поставив с обеих сторон непроницаемые стенки (рис. 3.1).

Мы ищем стационарные состояния с энергией E. Внутри потенциального ящика одномерное движение является свободным. Квантовая волна частицы массы m имеет волновое число k, которое определяется значением энергии с точностью до знака (двукратное вырождение). Двум знакам соответствуют волны, идущие вправо или влево. Бесконечно высокие стенки полностью отражают волну, которая при отражении меняет знак k на противоположный. Стационарная картина должна состоять из двух компонент:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}. \tag{3.1}$$

Мы уже знаем из предельного случая, разобранного в разделе 2.4, что под бесконечными потенциальным барьером волны не проходят и что выполняются *граничные условия*:

$$\psi(x = 0) = \psi(x = a) = 0. \tag{3.2}$$

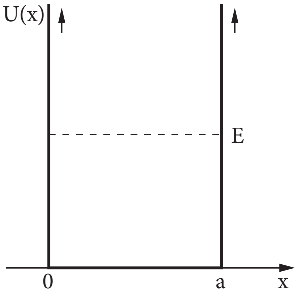

Рис. 3.1: Потенциал «ящика»

Условие для $x = 0$ даёт $B = -A$, что соответствует отсутствию потока через стенку. Следовательно, решение принимает синусоидальный вид (2.24):

$$\psi(x) = 2iA\sin(kx). \tag{3.3}$$

Для выполнения граничного условия на стенке $x = a$ уже нет свободных амплитуд ($A = 0$ приводит к тривиальному решению полного отсутствия волны, $\psi \equiv 0$). Единственный путь для удовлетворения граничного условия — это выбрать специальные *квантованные* значения волнового числа:

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, ... \tag{3.4}$$

($n = 0$ зануляет всю функцию, а отрицательные значения дают те же решения, но с противоположным знаком). Выбор (3.4) определяет дискретный энергетический спектр:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\, n^2, \tag{3.5}$$

и квантовое число n однозначно помечает стационарные состояния ψ_n.

Хотя добавление произвольного множителя не меняет относительные вероятности, волновые функции связанных состояний (финитное движение) могут быть нормированы в соответствии с (2.6). В данном случае нормировка может быть одинаковой для всех состояний n. Нормированные стационарные волновые функции получаются в виде *стоячих волн*:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \tag{3.6}$$

Возникшая картина в точности соответствует описанию нормальных колебаний струны, закреплённой на концах (рис. 3.2). В соответствии с услови-

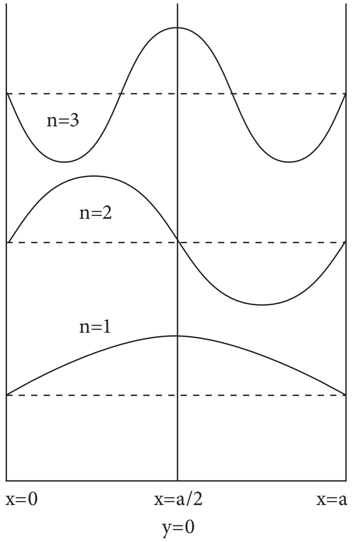

Рис. 3.2: Волновые функции низших стационарных уровней частицы в потенциальном ящике

ем квантования (3.4) длина a кратна целому числу полуволн: $a = n(\lambda/2)$. Вероятность $|\psi(x)|^2$ нахождения частицы в положении x осциллирует в пространстве, проходя через максимумы и минимумы (*узлы*, где $\psi(x) = 0$). При очень больших квантовых числах n колебания происходят настолько часто, что имеет смысл взять среднее значение $\sin^2$, равное $1/2$, в малом интервале Δx, который всё ещё содержит достаточно много периодов колебаний. Такая усредненная вероятность,

$$\overline{|\psi|^2}\,\Delta x = \frac{\Delta x}{a}, \tag{3.7}$$

соответствует естественному описанию частиц, равномерно распределённых между стенками. Однако, используя увеличительное стекло, мы смогли бы разрешить структуру минимумов и максимумов.

Легко обобщить это решение на *трёхмерный* ящик с размерами a, b и c вдоль трёх ортогональных осей x, y и z. В соответствии с граничными условиями волновая функция исчезает на всех стенках объёма $V = abc$. Следовательно, волновая функция характеризуется здесь тремя целыми

квантовыми числами n_x, n_y и n_z:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right), \tag{3.8}$$

а энергия стационарного состояния (3.8) равна

$$E(n_x,n_y,n_z) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right]. \tag{3.9}$$

3.2 Ортогональность и полнота

Набор стационарных волновых функций (3.6) с учётом временной зависимости, определяемой энергией (3.5),

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-(i/\hbar)E_n t}, \tag{3.10}$$

обладает стандартными свойствами, которые мы встретим и в более сложных примерах.

Число узлов внутри ящика равно $n-1$. Для каждого следующего состояние число узлов увеличивается на единицу. Волновые функции состояний имеют чередующуюся симметрию по отражению относительно середины ящика $x = a/2$. Если сдвинуть точку отсчёта, положив $y = x - a/2$ (рис. 3.2), то можно записать волновую функцию как косинус для нечётных n и синус для чётных n. Это позволяет разделить набор состояний на *чётные и нечётные функции* от y: $\psi(-y) = \psi(y)$ и $\psi(y) = -\psi(-y)$ соответственно. Таким образом, функциям можно приписать квантовое число *чётность* $\Pi_n = (-)^{n+1}$. В этом простом случае чётность не является дополнительным квантовым числом и полностью определяется номером n или энергией состояния E_n. Существование определённой чётности стационарного состояния следует из *симметрии* потенциала: ящик симметричен относительно центральной оси. Для трёхмерной коробки инверсия всех осей по отношению к центру позволяет определить чётность стационарного состояния как $\Pi = (-)^{n_x+n_y+n_z+1}$.

Легко проверить, что стационарные волновые функции, соответствующие разным энергиям, *ортогональны*. Определим ортогональность двух

функций в терминах интеграла от их произведения по объёму ящика:

$$\int_0^a dx\, \psi_m^*(x)\psi_n(x) = \delta_{mn}. \tag{3.11}$$

Здесь был использован дискретный *символ Кронекера*

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases} \tag{3.12}$$

Предвидя, что стационарные волновые функции в других случаях могут быть комплексными, хотя в случае ящика они вещественны, определим ортогональность с использованием *комплексного сопряжения* левой функции произведения, чтобы *норма* функции ($m = n$ в (3.11)) всегда была вещественна и положительна, а для нормированных функций равна 1.

Набор этих волновых функций также является *полным*: как следует из стандартного *преобразования Фурье*, любые колебания струны можно представить в виде суперпозиции *нормальных колебаний*, которые представляют из себя не что иное, как наши стационарные состояния. Произвольная функция $f(x)$ с нулевыми значениями на стенках ящика внутри этого ящика может быть разложена в ряд (в общем случае бесконечный) Фурье по синусам:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \psi_n(x). \tag{3.13}$$

Умножая обе части (3.13) на функцию ψ_m^*, с помощью ортогональности и условия нормировки (3.11) выделяем в правой части только слагаемое с номером m:

$$f_m = \int_0^a dx\, \psi_m^*(x) f(x). \tag{3.14}$$

Если разложение в ряд (3.13) корректно, то функция $f(x)$ полностью определяется коэффициентами f_n. Они несут ту же информацию, так что множество $\{f_n\}$ может быть названо волновой функцией в *энергетическом представлении*. Теперь, подставив выражение (3.14) в разложение (3.13), получаем:

$$f(x) = \int dx'\, f(x') \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x'). \tag{3.15}$$

Это должно быть тождеством: для любой функции $f(x)$, удовлетворяющей граничным условиям, сумма в (3.15) извлекает из полного интеграла (взятого по допустимому интервалу) значение этой функции в данной точке внутри интервала. Это условие *полноты* может быть сформулировано с помощью *дельта-функции Дира́ка*:

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x - x'). \tag{3.16}$$

Ниже мы напомним основные свойства дельта-функции.

3.3 Дельта-функция*

Дельта-функция $\delta(x - x_0)$ может быть определена на физическом уровне строгости как *интегральный оператор*, который, действуя на произвольную регулярную при $x = x_0$ функцию $f(x)$, извлекает значение этой функции в точке x_0:

$$\int dx\, \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0), \tag{3.17}$$

если точка $x = x_0$ находится *внутри* интервала интегрирования. Если интервал интегрирования не включает эту точку, то результат равен нулю. Для того чтобы так действовать, дельта-функция $\delta(x - x_0)$ должна равняться нулю везде, кроме точки $x = x_0$, в которой её значение становится *бесконечно большим*, чтобы результат интегрирования получился конечным.

Такие сингулярные функции даже не рассматриваются математиками как функции. Они принадлежат к классу *обобщённых функций* или *распределений*. Условие полноты (3.16) означает, что в любой паре точек $x \neq x'$ различные функции из бесконечного набора $\{\psi_n(x)\}$ имеют разные знаки и результат стремится к нулю после сложения бесконечного числа практически случайных вкладов. Напомним, что функции ортогональны и имеют разное количество узлов. Напротив, для $x = x'$ все вклады бесконечной суммы (3.16) положительны и результат этой суперпозиции бесконечен.

Можно подойти к описанию дельта-функции через *предельный переход*, начинающийся с «нормальной» функции, которая в процессе перехода концентрирует всю свою «силу» в одной точке $x = x_0$. Подобные процессы могут определяться по-разному. Будем считать, что процесс сходится к

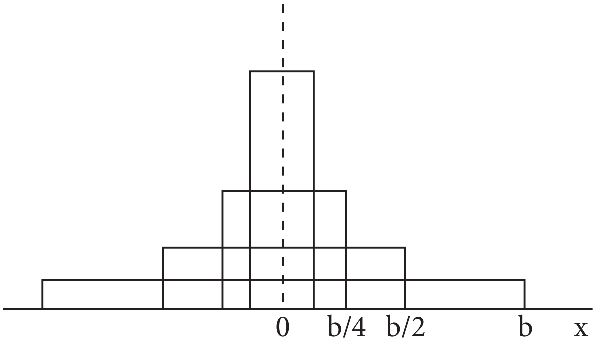

Рис. 3.3: Предельный переход, определяющий дельта-функцию

$x = x_0$ симметрично с обеих сторон, т. е. мы строим *чётную функцию*:

$$\delta(x) = \delta(-x). \tag{3.18}$$

Дополнительно дельта-функция нормирована, согласно

$$\int dx\, \delta(x - x_0) = 1, \tag{3.19}$$

по любому интервалу, включающему $x = x_0$ (фактически это частный случай выражения (3.17)). Если один из пределов интегрирования (3.19) совпадает с x_0, то результатом интегрирования будет 1/2 из-за симметрии δ-функции.

Для нашей цели можно использовать различные процессы. Самый простой способ заключается в рассмотрении последовательности прямоугольников с точкой x_0 в середине, шириной b_N и высотой $1/b_N$ (рис. 3.3). Если $b_{N+1} = b_N/2$, то предельный $N \to \infty$ прямоугольник имеет бесконечную высоту и исчезающе малую ширину с фиксированной под прямоугольником площадью равной единице (3.19). В пределе этот прямоугольник под интегралом (3.17) «вырезает» значение любой регулярной функции в точке сингулярности.

Среди других возможностей упомянем последовательность *функций Гаусса*. Распределение Гаусса $\mathcal{G}(x; x_0, \sigma)$, которое играет существенную роль в статистическом анализе, имеет вид

$$\mathcal{G}(x; x_0, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}. \tag{3.20}$$

Это колоколообразная кривая, которая везде положительна, симметрична относительно центра $x = x_0$ и нормирована на единицу для любых значений x_0 и *ширины* σ:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathcal{G}(x; x_0, \sigma) = 1. \tag{3.21}$$

Поэтому функцию Гаусса можно интерпретировать как нормированное распределение вероятности переменной x. Из-за симметрии среднее значение x, которое мы отмечаем угловыми скобками, определяется математическим ожиданием:

$$\langle x \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, \mathcal{G}(x; x_0, \sigma) = x_0, \tag{3.22}$$

а квадрат отклонений от x (*вариация*) даётся параметром ширины σ:

$$\langle (x - x_0)^2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (x - x_0)^2 \mathcal{G}(x; x_0, \sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 \mathcal{G}(x; 0, \sigma) = \sigma^2. \tag{3.23}$$

При $\sigma \to 0$ распределение Гаусса становится очень узким и очень высоким в центре, таким образом приближаясь к дельта-функции с правильной нормировкой:

$$\lim_{\sigma \to 0} \mathcal{G}(x; x_0, \sigma) = \delta(x - x_0). \tag{3.24}$$

Ещё два важных представления дельта-функции,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-x_0)} = 2\pi\delta(x - x_0), \quad \lim_{\eta \to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(x - x_0)^2 + \eta^2} = \delta(x - x_0), \tag{3.25}$$

появятся в дальнейших лекциях.

Нам нужно научиться работать с дельта-функцией. Для изменения масштаба переменной используется следующее простое правило:

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}. \tag{3.26}$$

Действительно, подставляя $\xi = ax$, получаем

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\, f(x)\delta(ax) = \frac{1}{a}\int_{-a\varepsilon}^{a\varepsilon} d\xi\, f\left(\frac{\xi}{a}\right)\delta(\xi) = \\ = \frac{1}{a}\, f(0)\int_{-a\varepsilon}^{a\varepsilon} d\xi\,\delta(\xi) = \frac{1}{a}\, f(0)\, sign(a) = \frac{f(0)}{|a|}. \tag{3.27}$$

Если функциональный аргумент $g(x)$ в $\delta(g(x))$ имеет несколько простых корней r_i, $g(r_i) = 0$, то в непосредственной близости от $x = r_i$ функция $g(x)$ может быть приближённо представлена как $(dg/dx)_{r_i}(x - r_i)$. Следовательно, используя (3.26), получаем:

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - r_i)}{|(dg/dx)_{r_i}|}. \tag{3.28}$$

Из выражения

$$\int dx\, f(x)x\delta(x) = [f(x)x]_{x\to 0} \tag{3.29}$$

мы можем принять, что

$$x\delta(x) = 0, \tag{3.30}$$

где левая часть рассматривается как оператор, применяемый к интегрированию функции $f(x)$, которая не имеет особенности при $x \to 0$ типа $\sim 1/x$ или сильнее.

3.4 Эволюция волновой функции со временем

Полнота набора стационарных волновых функций позволяет решить проблему развития произвольного начального состояния во времени. Начнём с волновой функцией $\Psi(x, t = 0) = f(x)$. В соответствии с формулой (3.13) начальное состояние представляет собой суперпозицию нормальных мод $\psi_n(x)$ с амплитудами f_n, определяемыми из условий ортогональности (3.14):

$$f_n = \int dx' \psi_n^*(x')\Psi(x', 0). \tag{3.31}$$

Каждая нормальная мода — это отдельная гармоническая составляющая, которая эволюционирует во времени в соответствии со своей собственной

частотой $\omega_n = E_n/\hbar$. Поэтому временное развитие при $t > 0$ определяется *интерференцией* всех имевшихся (возбуждённых вначале) гармоник:

$$\Psi(x,t) = \sum_n f_n \psi_n(x) e^{-(i/\hbar)E_n t}. \tag{3.32}$$

Аналогично (2.19) коэффициенты f_n волновой функции в энергетическом представлении должны быть интерпретированы как амплитуды вероятности нахождения системы в стационарном состоянии ψ_n, так что соответствующая вероятность равна $w_n = |f_n|^2$.

Задача 3.1

Покажите, что нормировка состояния $\int dx\, |\Psi(x,t)|^2$ сохраняется во времени, и если начальная нормировка была определена как $\int dx\, |\Psi(x,0)|^2 = 1$, то величины w_n нормированы как вероятности:

$$\sum_n w_n = \sum_n |f_n|^2 = 1. \tag{3.33}$$

Таким образом, вероятностная интерпретация может быть использована как в пространственном, так и в энергетическом представлениях волновых функций. Оба эти представления несут равноценную информацию.

Задача 3.2

Частица в бесконечно высоком потенциальном ящике шириной a в начальный момент представлена волновой функцией $\Psi(x, t = 0) = A \sin^3(\pi x/a)$. Найти волновую функцию в произвольный момент времени $t > 0$. Вернётся ли частица в исходное состояние в какой-то определённый момент T?

Полезно ввести *пропагатор* или *функцию Грина* $G(x, t; x', 0)$, которая преобразует начальную волновую функцию при $t = 0$ в функцию, соответствующую произвольному моменту времени t:

$$G(x, t; x', 0) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-(i/\hbar)E_n t}. \tag{3.34}$$

Подставив это определение и амплитуды (3.31) в (3.32), можно записать закон эволюции во времени как

$$\Psi(x,t) = \int dx'\, G(x, t; x', 0) \Psi(x', 0). \tag{3.35}$$

Начальное состояние получается из этого выражения автоматически при подстановке $t = 0$, так как из (3.34) и (3.16) следует, что

$$G(x, 0; x', 0) = \delta(x - x'). \tag{3.36}$$

При отсутствии зависящих от времени внешних сил выбор начального момента времени является произвольным. В качестве начального момента времени можно выбрать t', тогда функция Грина будет зависеть только от разности времён $t - t'$:

$$G(x, t; x', t') = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x')e^{-(i/\hbar)E_n(t-t')}, \tag{3.37}$$

$$\Psi(x, t) = \int dx'\, G(x, t; x', t')\Psi(x', t'). \tag{3.38}$$

Здесь интегрирование учитывает интерференцию волн, приходящих в точку x в момент t, от всех возможных источников x' в фиксированный начальный момент t' (интегрирование по t' отсутствует).

Задача 3.3

Внезапное возмущение. Частица находилась в основном состоянии потенциального ящика, как на рис. 3.1. В момент времени $t = 0$ правая стенка была мгновенно перенесена из $x = a$ в $x = b > a$ в соответствии с рис. 3.4. Какова вероятность того, что при $t > 0$ в новом ящике частица окажется в возбуждённом состоянии? Обсудите специально случай $b = 2a$.

Решение.

Внезапное изменение параметров не меняет волновую функцию $\Psi(x, 0)$, которая служит отправной точкой для будущей эволюции (3.32). Однако это развитие определяется теперь новыми условиями. Для нахождения амплитуд f_n нам нужно разложить начальную волновую функцию $\psi_{1;\,\text{старая}}(x)$ по стационарным волновым функциям $\psi_{n;\,\text{новая}}(x)$ *нового ящика*:

$$f_n = \int_0^a dx\, \psi^*_{n;\,\text{новая}}(x)\psi_{1;\,\text{старая}}(x) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \int_0^a dx\, \sin\left(\frac{n\pi x}{b}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right). \tag{3.39}$$

После интегрирования получаем

$$f_n = \frac{2\sqrt{\lambda}}{\pi} \frac{\sin(n\pi\lambda)}{n^2\lambda^2 - 1}, \quad \lambda = \frac{a}{b}. \tag{3.40}$$

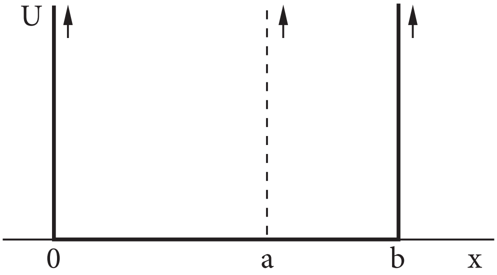

Рис. 3.4: Иллюстрация для задачи 3.3

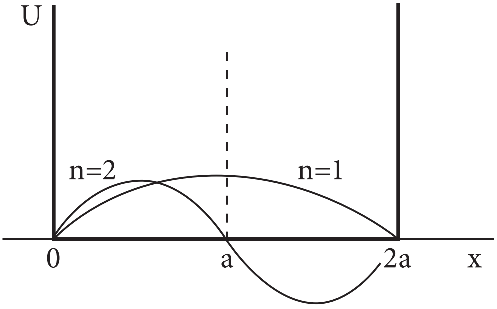

Рис. 3.5: Вариант $b = 2a$, задача 3.3

Вероятность остаться на основном уровне в новом потенциале равна

$$w_1 = |f_1|^2 = \frac{4\lambda}{\pi^2} \frac{\sin^2(\pi\lambda)}{(\lambda^2 - 1)^2}. \tag{3.41}$$

Вероятность оказаться в возбуждённом состоянии $n = 2, 3, ...$ равна

$$w_{\text{возбуждения}} = 1 - w_1. \tag{3.42}$$

В случае, когда $b = 2a$, $\lambda = 1/2$, (рис. 3.5) вероятность возбуждения:

$$w_n = |f_n|^2 = \frac{2}{\pi^2} \frac{\sin^2(\pi n/2)}{[(n^2/4) - 1]^2}. \tag{3.43}$$

В этом случае возбуждаются состояния только с нечётными n. Для чётных значений n новая функция является нечётной по отношению к новой середине ящика $x = a$, и, соответственно, там находится узел. Поэтому такого рода функции также удовлетворяют граничным условиям для *старого*

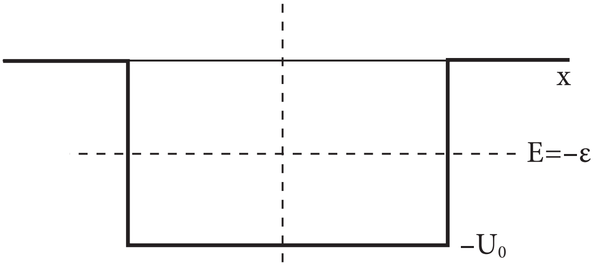

Рис. 3.6: Потенциальная яма конечной глубины

ящика и не могут возбудиться, так как являются ортогональными к начальной волновой функции, поскольку интегрирование проводится в пределах старого ящика. Случай $n = 2$ является единственным исключением, так как здесь новая функция представляет собой просто антисимметричное продолжение до новой стенки старого основного состояния (рис. 3.2 и 3.5). Раскрытие неопределённости в (3.43) даёт

$$w_2 = \frac{1}{2} = 50\ \%, \tag{3.44}$$

в то время как $w_1 = 32/9\pi^2 = 36\ \%$.

3.5 Мелкая яма и квантовое гало

Теперь перейдём от ящика с бесконечными стенками к более реалистичному примеру притягивающей потенциальной ямы *конечной глубины* U_0. Пусть потенциал за её пределами выходит на одинаковый уровень с обеих сторон. Примем это значение потенциала за ноль энергетической шкалы (рис. 3.6). Вертикальная пунктирная линия в середине колодца аналогично рис. 3.2 соответствует симметричному выбору начала координат.

Задача 3.4

Покажите, что яма на рис. 3.6 содержит как минимум одно связанное состояние для любой ширины a и глубины U_0.

Решение.

Волновая функция основного состояния с энергией $E = -\varepsilon$ должна экспоненциально затухать под барьерами с обеих сторон (классически

запрещённая область):

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & x < 0, \\ De^{-\kappa(x-a)}, & x > a, \end{cases} \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}. \tag{3.45}$$

Внутри ямы должна существовать стоячая волна аналогично (3.1):

$$\psi(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(U_0 - \varepsilon)}{\hbar^2}}. \tag{3.46}$$

Выполняя сшивку на границах, мы получаем выражение, которое определяет энергию ε:

$$\frac{\kappa}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right). \tag{3.47}$$

Это уравнение всегда имеет по крайней мере одно положительное решение ε. В пределе *мелкой ямы*, $ka \ll 1$, уровень очень *слабо связан* $\varepsilon \ll U_0$. Для мелкой ямы $k \approx k_0 \equiv \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$ и

$$\frac{\kappa}{k} \approx \frac{k_0 a}{2}, \quad \kappa \approx \frac{k_0^2 a}{2} \quad \rightsquigarrow \quad \varepsilon = \frac{m(U_0 a)^2}{2\hbar^2}. \tag{3.48}$$

Это согласовано с приближением $\varepsilon \ll U_0$, если

$$\xi \equiv \frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \ll 1. \tag{3.49}$$

Выражение (3.49) даёт критерий *мелкой ямы* или слабого притяжения. Результат согласуется с требованием $k_0 a \ll 1$ и показывает, что пространственный размер волновой функции в слабо связанном состоянии значительно больше, чем размер a потенциальной ямы. Волновая функция *не локализована* внутри ямы: её длина локализации (2.48) удовлетворяет требованию $1/\kappa \gg a$. Как упоминалось выше, системы, в которых хвосты волновой функции связанного состояния тянутся далеко в *классически запрещенную область*, называются теперь *галообразующими* (halo systems). Есть много примеров подобных систем в ядерной и молекулярной физике.

Техническая проблема по удовлетворению граничных условий задачи 3.4 может быть упрощена путём выбора начала координат оси x таким образом, чтобы края ямы соответствовали значениям $x = \pm a/2$. В этом случае потенциальная яма становится симметричной относительно инверсии $x \to (-x)$.

Можно ожидать, что решения в этом случае будут иметь *определённую чётность*, подобно тому, что мы видели для решений в потенциальном ящике. Тогда вместо уравнений (3.45) и (3.46) можно искать решение в виде не имеющей узлов *чётной* волновой функции:

$$\psi(x) = Ae^{\pm\kappa x}, \quad |x| > \frac{a}{2}, \tag{3.50}$$

и

$$\psi(x) = B\cos(kx), \quad |x| < \frac{a}{2}, \tag{3.51}$$

где k и κ имеют те же значения, что и в (3.45)–(3.46). Теперь достаточно выполнить сшивку только с одной стороны.

Задача 3.5

Частица помещается в потенциальную яму конечной глубины U_0 рис. 3.6. Ширина ямы a определена таким образом, что в ней существует только одно связанное состоянии с энергией связи $\varepsilon = U_0/2$. Вычислите вероятности того, что частица находится в классически разрешённой и классически запрещённой областях.

Решение.

В наших условиях значительное упрощение следует из того факта, что:

$$\varepsilon = \frac{U_0}{2} \quad \rightsquigarrow \quad k = \kappa = \sqrt{\frac{mU_0}{\hbar^2}}. \tag{3.52}$$

При симметричного выборе координат сшивка на одной из границ, например, $x = a/2$, даёт

$$B\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = Ae^{-\kappa a/2}, \quad -Bk\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -kAe^{-\kappa a/2}. \tag{3.53}$$

Отношение этих двух уравнений приводит к соотношению (3.47) между параметрами:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = 1 \quad \rightsquigarrow \quad ka = \frac{\pi}{2}. \tag{3.54}$$

Доля вероятности, приходящаяся на запрещённую область (за пределами потенциальной ямы), равна

$$P_{\rm out} = 2\int_{a/2}^{\infty} dx\, A^2 e^{-2\kappa x} = \frac{A^2}{k} e^{-ka}. \tag{3.55}$$

В силу условий сшивки (3.53) и (3.54) это равнозначно:

$$P_{\rm out} = \frac{B^2}{k}\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{B^2}{2k}. \tag{3.56}$$

Аналогично доля вероятности, приходящаяся на внутреннюю часть, равна

$$P_{\rm in} = 2\int_0^{a/2} dx\, B^2 \cos^2(kx) = \frac{B^2}{2k}[ka + \sin(ka)] = \frac{B^2}{2k}\left(\frac{\pi}{2} + 1\right). \tag{3.57}$$

Отношение этих вероятностей равно

$$\frac{P_{\rm out}}{P_{\rm in}} = \frac{2}{2+\pi}, \tag{3.58}$$

и, используя $P_{\rm out} + P_{\rm in} = 1$, мы приходим к

$$P_{\rm out} = \frac{2}{4+\pi} = 0.28, \quad P_{\rm in} = \frac{2+\pi}{4+\pi} = 0.72. \tag{3.59}$$

Доказательство существования связанного состояния в задаче 3.4 было основано на приближении $k \approx k_0$, для которого требовалось, чтобы $U_0 \gg \varepsilon$. Выполним это неравенство в предположении, что глубина $U_0 \to \infty$, в то время как ширина стремится к нулю $a \to 0$ таким образом, что площадь потенциальной ямы $U_0 a \equiv g$ сохраняется. Этот предел соответствует притягивающему *дельта-потенциалу* (рис. 3.7):

$$U(x) = -g\delta(x). \tag{3.60}$$

В соответствии с (3.48) этот потенциал для любого значения $g > 0$ имеет одно связанное состояние с энергией связи

$$\varepsilon = \frac{mg^2}{2\hbar^2}. \tag{3.61}$$

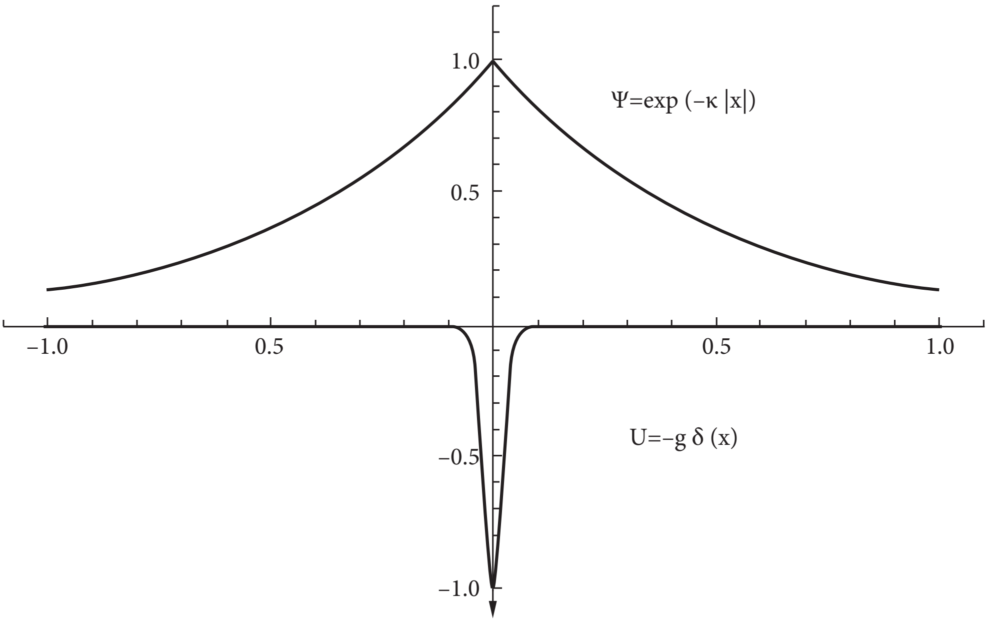

Рис. 3.7: Притягивающий дельта-потенциал и волновая функция связанного состояния

В этом случае волновая функция состоит из двух симметрично затухающих экспонент

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = \frac{mg}{\hbar^2}; \tag{3.62}$$

вся жизнь связанного состояния проходит *снаружи* области притяжения. Отметим, что вследствие бесконечной величины потенциала при $x = 0$ у функции (3.62) в этой точке происходит скачок производной:

$$\psi'(x-0) - \psi'(x+0) = 2\kappa\psi(0), \tag{3.63}$$

хотя сама функция непрерывна.

Только одномерные ямы с *симметричными* краями, как на рис. 3.6, где потенциал имеет одно и то же предельное значение с обеих сторон, всегда содержат по крайней мере одно связанное состояние. Рассмотрим случай потенциальной ямы с одной непроницаемой стенкой (рис. 3.8). Если вместо бесконечного барьера мы просто отразим в области $x < 0$ барьер, существующий при $x > 0$, то задача сведётся к предыдущему случаю,

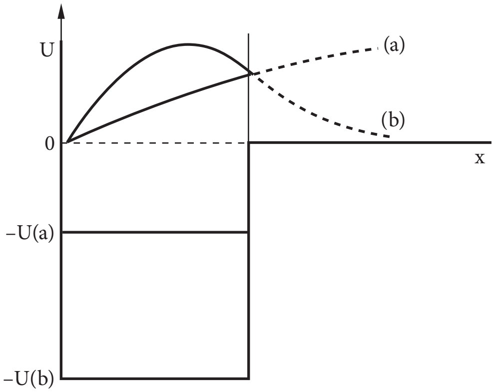

Рис. 3.8: Потенциальная яма рядом с непроницаемой стенкой

когда связанное состояние всегда существует. Тем не менее бесконечная стенка требует нулевого значения волновой функции $\psi(0) = 0$ в начале координат. С точки зрения удвоенной ямы это означает, что нужно отобрать только *нечётные* волновые функции. Основное связанное состояние в симметричной яме описывается *чётной* по отношению к середине функцией. Существует ли в этом случае нечётное связанное состояние, необходимо рассмотреть отдельно. Оказывается, что такое связанное состояние существует только для достаточно глубокой и широкой ямы (рис. 3.8).

Внутри потенциальной ямы, $0 < x < a$, решение является суперпозицией (3.46) e^{ikx} и e^{-ikx}, где k — внутренний волновой вектор. Условие в начале координат позволяет выбрать правильную нечётную комбинацию:

$$\psi(x) = A\sin(kx), \quad 0 < x < a. \tag{3.64}$$

За пределами потенциальной ямы, $x > a$, эта функция должна перейти в *убывающую* экспоненту $Be^{-\kappa x}$, где κ зависит от энергии связи (3.45). При гладкой сшивке *логарифмическая производная* $\lambda \equiv \psi'/\psi$ также непрерывна. Эта величина удобна, так как исключает величины неизвестных амплитуд. В нашем случае $\lambda < 0$ снаружи ямы. Тот же отрицательный знак требуется для собственной функции (3.64). Если $ka < \pi/2$, то $\sin(kx)$ по-прежнему растёт при $x = a$, $\lambda > 0$ и для связанного состояния сшивка невозможна. Увеличивая глубину или расширяя яму, мы увеличиваем ka. Критическим является случай $ka = \pi/2$, когда наклон горизонтален. Как только будет выполнено условие $ka > \pi/2$, тогда появится решение с отрицательным наклоном сначала с очень малым κ, энергией связи ε, близкой к

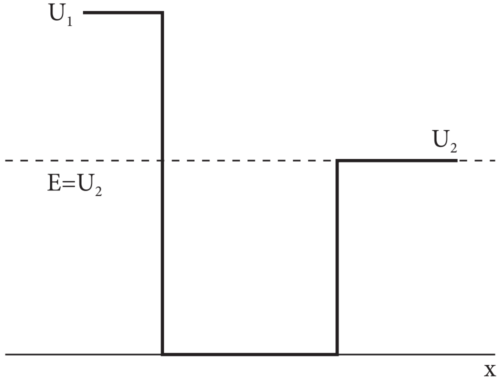

Рис. 3.9: Асимметричная потенциальная яма

нулю, и длинным хвостом в запрещённой области. Когда яма углубляется, энергетический уровень тоже идёт вниз. Таким образом, первое связанное состояние появляется при *критической глубине*:

$$U_{crit} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}(ka)^2_{crit} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}. \tag{3.65}$$

С дальнейшим увеличением произведения U_0a^2 появится новый уровень при горизонтальном наклоне внутренней функции на границе.

Задача 3.6

Рассмотрите асимметричную потенциальную яму (рис. 3.9), где потенциал с левой и правой стороны имеет пределы U_1 и U_2 соответственно. При каких условиях в этой яме будет существовать связанное состояние?

Решение.

Если $U_1 \geqslant U_2$, то условие существования имеет вид

$$\tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_2}}\right) \leqslant \sqrt{\frac{2ma^2U_2}{\hbar^2}}. \tag{3.66}$$

Для того чтобы ответить на вопрос задачи, достаточно рассмотреть момент возникновения решения с $E = U_2$. Решение всегда существует, если $U_1 = U_2$. А если $U_1 \gg U_2$, то (3.66) совпадает с (3.65).

Задача 3.7

Электрон движется в потенциале, сформированном бесконечно высокой потенциальной стенкой $x = 0$. На конечном расстоянии от стенки a находится притягивающая потенциальная яма глубиной W и протяжённостью

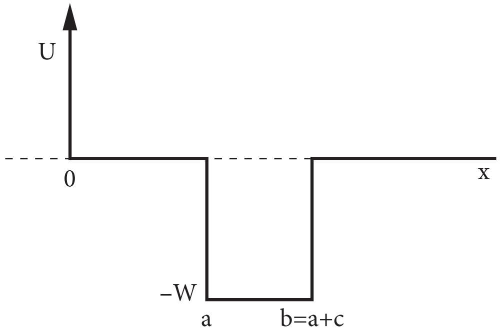

Рис. 3.10: Иллюстрация к задаче 3.7

от $x = a$ до $x = b > a$ (рис. 3.10). Докажите, что в этом потенциале не всегда есть связанное состояние. Объясните качественно, как изменение параметров W, a и $c = b - a$ влияет на существование связанного состояния. Найдите расстояние a, соответствующее первому появлению связанного состояния в яме, если $W = 0.25$ эВ, а ширина ямы $c = b - a = 1\,\mathring{A}$.

Решение.

Волновая функция связанного состояния с энергией связи ε имеет вид

$$\psi(x) = A\sinh(\kappa x), \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}, \quad 0 \leqslant x < a; \tag{3.67}$$

$$\begin{gathered} \psi(x) = B\sin[k(x-a)] + C\cos[k(x-a)], \\ k = \sqrt{\frac{2m(W-\varepsilon)}{\hbar^2}}, \quad a < x < b; \end{gathered} \tag{3.68}$$

$$\psi(x) = De^{-\kappa(x-b)}, \quad x > b. \tag{3.69}$$

Выбор определяется условием $\psi(0) = 0$, которое отбирает гиперболический синус, как правильную суперпозицию падающей и растущей экспонент. Волновая функция $\psi(x)$ должна убывать под барьером справа. Внутри ямы в качестве решения можно выбрать суперпозицию двух бегущих волн $e^{\pm ikx}$ или эквивалентную форму (3.68). Сдвиг фазы в (3.68) и (3.69) упрощает последующие выражения.

Четыре условия для сшивки приводят к системе четырёх *однородных* линейных уравнений для амплитуд A, B, C и D. Эта система может иметь нетривиальное решение только при выполнении дополнительного условия (определитель системы равен нулю). В этом случае проще всего исключить

коэффициенты один за другим. Условия записываются как

$$A\sinh(\kappa a) = C, \quad \kappa A\cosh(\kappa a) = kB; \tag{3.70}$$

$$B\sin(kc) + C\cos(kc) = D, \quad kB\cos(kc) - kC\sin(kc) = -\kappa D. \tag{3.71}$$

Теперь выражаем C и B в терминах A из (3.70) и подставляем в (3.71). Получаем, что

$$A[\kappa\cosh(\kappa a)\sin(kc) + k\sinh(\kappa a)\cos(kc)] = kD \tag{3.72}$$

и

$$A[\kappa\cosh(\kappa a)\cos(kc) - k\sinh(\kappa a)\sin(kc)] = -\kappa D. \tag{3.73}$$

Отношение двух этих выражение даёт искомое условие

$$\kappa = k\,\frac{k\sinh(\kappa a)\sin(kc) - \kappa\cosh(\kappa a)\cos(kc)}{k\sinh(\kappa a)\cos(kc) + \kappa\cosh(\kappa a)\sin(kc)}. \tag{3.74}$$

Нас интересует момент появления связанного состояния в потенциальной яме. В этом случае и энергия связи ε, и κ стремятся к нулю и мы можем воспользоваться разложениями $\cosh(\kappa a) \approx 1$ и $\sinh(\kappa a) \approx \kappa a$. В этом пределе $k = (2mW/\hbar^2)^{1/2}$ и (3.74) даёт:

$$\kappa = k\,\frac{ka\sin(kc) - \cos(kc)}{ka\cos(kc) + \sin(kc)}. \tag{3.75}$$

Отсюда понятно, что уровень появляется в момент, когда

$$\tan(kc) = \frac{1}{ka}. \tag{3.76}$$

С увеличением расстояния до стенки a мы идём к пределу симметричной потенциальной ямы, которая всегда содержит связанное состояние (для больших a влияние отталкивающего потенциала непроницаемой стенки, требующей $\psi(0) = 0$, уменьшается). Также шанс возникновения связанного состояния увеличивается при увеличении глубины (рост k) и ширины (рост c) ямы. Следовательно, условие на существование связанного состояния можно представить как

$$\tan(kc) \geqslant \frac{1}{ka}. \tag{3.77}$$

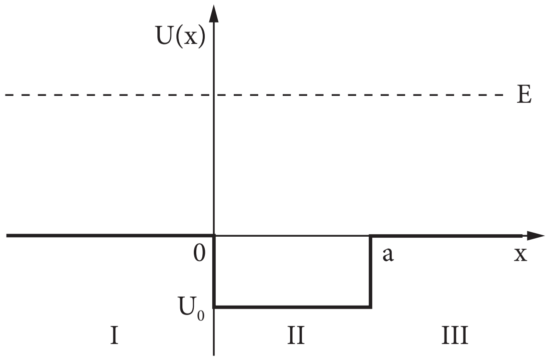

Рис. 3.11: Прохождение волны над потенциальной ямой

Отображая на графике обе части как функции k, можно получить искомую область существования. Для мелких или узких ям, $kc \ll 1$, условие упрощается и выражение (3.77) можно записать как

$$k^2 ac = \frac{2mWac}{\hbar^2} \geqslant 1. \tag{3.78}$$

С нашими численными значениями переход от (3.77) к (3.78) вполне обоснован, так как $kc = 1/16$, и чтобы возникло связанное состояние, нам нужна очень широкая яма, $a > 16\,\mathring{A}$.

3.6 Резонансы

Здесь мы обсудим прохождение волн над потенциальными ямами (рис. 3.11). Существование связанных состояний с отрицательной энергией влияет на прохождение волн с положительной энергией. Решение аналогично решению задачи 2.4. Отличие волновых функций в яме по сравнению с (2.50) заключается в том, что волновой вектор здесь является вещественным, $k' = \sqrt{2m(E+U_0)/\hbar^2}$. Результат для коэффициента прохождения может быть получен из (2.55) изменением знака U_0 и заменой $\sinh(\kappa a)$ на $\sin(k'a)$:

$$T(E) = \frac{4E(E+U_0)}{4E(E+U_0) + U_0^2 \sin^2(k'a)}. \tag{3.79}$$

В пределе низких энергий, $E \to 0$, $k' \to k_0 = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$, коэффициент прохождения, казалось бы, стремится к нулю пропорционально энергии:

$$T(E) \approx \frac{4E}{U_0 \sin^2(k_0 a)}. \tag{3.80}$$

Однако, если $k_0 a = n\pi$, где $n = 1, 2, ...$, $\sin(k_0 a) = 0$ и нам необходимо вернуться к точному выражению (3.79). Можно заметить, что при $E \to 0$ и $k_0 = n\pi$ возникает *абсолютное прохождение*, $T(E) \to 1$. Более того, прохождение становится абсолютным всегда, когда выполняется условие

$$k'a = n\pi \quad \rightsquigarrow \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} - k_0^2. \tag{3.81}$$

Уровни энергии, удовлетворяющие условию (3.81), обычно называются *резонансными*. С эффективной длинной волны $\lambda' = 2\pi/k'$ резонанс возникает, когда $2a = n\lambda'$. Волна, идущая слева, отражаясь от правой границы ямы, возвращается к левой границе, проходя дополнительный путь $2a$, но при этом имеет ту же фазу, что и падающая волна. Отсутствие деструктивной интерференции гарантирует абсолютное прохождение. Это одномерный аналог *эффекта Рамза́уэра — Таунсе́нда*, аномально слабого рассеяния (резонансное прохождение) медленных электронов на атомах газа при определённых энергиях.

3.7 Плотность уровней

Из нашего опыта с потенциальным ящиком в разделе 3.1 можно извлечь полезную информацию для исследования систем многих тел. Посмотрим на уровни энергии частицы в трехмерном ящике (3.9). Они определяются квантованным волновым вектором:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \mathbf{k} = \pi\left(\frac{n_x}{a}, \frac{n_y}{b}, \frac{n_z}{c}\right). \tag{3.82}$$

В пределе больших квантовых чисел n_i концы дозволенных векторов $\mathbf{k}$ покрывают положительный октант эллиптической поверхности постоянной энергии (*изоэнергетическая поверхность*) достаточно плотно. В изотропном случае $a = b = c$ эллипсоид переходит в сферу. Когда частицы занимают множество одночастичных состояний, важно знать, как много этих состояний расположено вблизи конкретной энергии E. Это будет существенно влиять на отклик системы при внешнем возмущении.

На этом пути мы приходим к идее *плотности уровней.* Для любых квантовых систем со спектром энергий E_α эта плотность формально определяется как частокол дельта-пиков при каждой разрешённой энергии:

$$\rho(E) = \sum_\alpha \delta(E - E_\alpha). \tag{3.83}$$

Эта сингулярная функция приобретает ясный смысл при интегрировании по малому интервалу ΔE, который всё ещё содержит множество уровней при достаточно больших квантовых числах. Интеграл равен числу ΔN дельта-пиков внутри интервала, т. е. количество уровней в ΔE равно

$$\Delta N = \int_{\Delta E} dE\,\rho(E) \approx \overline{\rho(E)}\,\Delta E. \tag{3.84}$$

Это соответствует интуитивной идее плавной плотности уровней $\overline{\rho(E)}$. Ниже мы работаем только с этой гладкой функцией, поэтому можно убрать знак усреднения. Таким образом, плавная плотность уровней практически определяется отношением

$$\rho(E) = \frac{\Delta N}{\Delta E}. \tag{3.85}$$

Интегрируя плотность уровней по всем энергиям от минимально возможной энергии E_0 (основное состояние) до произвольной энергии E, можно определить *совокупное* число уровней $\mathcal{N}(E)$ с энергией меньше E:

$$\mathcal{N}(E) = \int_{E_0}^{E} dE'\,\rho(E'). \tag{3.86}$$

Для потенциального ящика с энергетическим спектром (3.82) плотность уровней легко вычисляется. Выбирая вместо квантовых чисел n_i в качестве новых переменных компоненты k_i вектора $\mathbf{k}$ и заменяя сумму по n_i интегралом $\int d^3k$, что можно делать, если наша энергия E находится в области больших квантовых чисел, получаем

$$\rho(E) = \frac{abc}{\pi^3}\int_{k_i>0} d^3k\,\delta(E - \hbar^2k^2/2m). \tag{3.87}$$

Пусть объём ящика $V = abc$. Мы можем распространить интегрирование на всё пространство, так как вклады каждого из октантов одинаковы (энергия

зависит от $\mathbf{k}^2$):

$$\rho(E) = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \delta(E - \hbar^2k^2/2m). \tag{3.88}$$

Теперь мы используем $d^3k = k^2dk\, do$. Интегрирование по телесному углу do даёт 4π. Так как $dk = (dk/dE)dE$, то интеграл по энергии, в согласии с правилом интегрирования дельта-функций, даёт:

$$\rho(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left[k^2\frac{dk}{dE}\right]_{E=\hbar^2k^2/2m} = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m^3E}; \tag{3.89}$$

плотность уровней в ящике растёт $\sim \sqrt{E}$.

Задача 3.8

Покажите, что в аналогичном подходе для *двумерного* ящика $\rho(E)$ не зависит от энергии, а в *одномерном* случае она даже уменьшается $\propto 1/\sqrt{E}$ с ростом энергии (действительно, в этом случае расстояние между соседними уровнями (3.5) *увеличивается* для больших квантовых чисел).

Результат (3.88) основан только на квантовании импульса $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Он может быть переписан в форме, применимой для любого *закона дисперсии*, т. е. для произвольной зависимости (например, релятивистской) $E(\mathbf{p})$:

$$\rho(E) = V \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, \delta(E - E(\mathbf{p})). \tag{3.90}$$

Этот выражение следует также из принципа квантования Бора (раздел 1.3). Каждый новый уровень требует (рис. 1.4) дополнительную площадь $2\pi\hbar$ на фазовой плоскости или дополнительный объём $(2\pi\hbar)^d$ в d-мерном фазовом пространстве. Повторяя вычисления для частиц с произвольным изотропным законом дисперсии $E(p)$ и вводя скорость $v = dE/dp$, мы получаем

$$\rho(E) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}\left(\frac{p^2}{v}\right)_{E=E(p)}. \tag{3.91}$$

Как было показано *Генри Вейлем*, этот результат не зависит от формы объёма, если сам объём достаточно большой и мы можем заменить суммы на интеграл по квантовым числам [5]. Если частицы имеют ненулевой спин или другие внутренние квантовые числа, которые не влияют на

энергию, то плотность уровней должна быть умножена на внутренний *фактор вырождения* g, равный для спина s числу вырожденных проекций спина $2s+1$ (статистический вес). Плотность уровней играет одну из основных ролей в *квантовой статистической механике.*

Задача 3.9

Найдите плотность уровней для фотонов в полости.

Решение.

Используя закон дисперсии $E = cp$ и $g = 2$ (для данного волнового вектора допустимы только поперечные поляризации), получаем

$$\rho(E) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} E^2. \tag{3.92}$$

3.8 Периодические граничные условия

Для получения плотности уровней мы использовали нулевые граничные условия на стенках ящика. Для больших систем результат не зависит от конкретных граничных условий. Для рассмотрения движения электронов или других объектов в макроскопическом твёрдом теле часто бывает удобно использовать *периодические граничные условия*. А именно, мы предполагаем, что наш образец с размерами a, b и c дополняется со всех сторон его точными копиями. Левый край нашей «клетки» является правым краем соседней области, который должен повторить правый край оригинальной клетки. Поэтому волновая функция повторяется с периодами a, b и c. Например, она не меняется при сдвиге a вдоль оси x: $\psi(x+a) = \psi(x)$. Для плоской волны, $\psi(x) = \exp[(i/\hbar)p_x x]$, это означает, что волна пересекает границу без изменений:

$$e^{(i/\hbar)p_x(x+a)} = e^{(i/\hbar)p_x x} \quad \rightsquigarrow \quad p_x = \frac{2\pi\hbar}{a} n. \tag{3.93}$$

Кажется, что это квантование даёт в два раза меньшее число уровней, чем результат (3.4) в случае ящика. Но для экспоненциальной функции положительные и отрицательные значения n различимы, что и восстанавливает правильное общее число состояний. Более того, в данном случае число состояний на самом деле больше на одно, поскольку также допускается $n = 0$. Тем не менее для очень большого общего количества состояний эта

разница не имеет значения. В общем случае изменение граничных условий меняет количество уровней не более, чем на один.

Периодические граничные условия после перехода к интегрированию вместо суммы по дискретным компонентам момента,

$$\sum_{\mathbf{p}} \Rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p, \tag{3.94}$$

приводят к такой же плотности уровней, что и в (3.90). В случае дискретного квантования в ограниченном объёме плоская волна может быть нормирована в соответствии с

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}. \tag{3.95}$$

При этой нормировке плоские волны с различными значениями квантованного импульса ортогональны. Аналогично (3.11)

$$\int_V d^3r\, \psi^*_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}, \tag{3.96}$$

где векторный символ Кро́некера подразумевает равенство всех компонент двух соответствующих дискретных векторов. Полнота набора плоских волн в объёме (3.16) даёт

$$\sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\psi^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}') = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}} e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{3.97}$$

где координаты $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ предполагаются внутри исходной клетки. В пределе бесконечного объёма рецепт (3.94) даёт

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{3.98}$$

представление (3.25) для трёхмерной дельта-функции

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z'). \tag{3.99}$$

Использование периодических граничных условий возможно, даже если мы рассматриваем задачу в бесконечном пространстве. В этом случае большой объём V является не физическим объёмом, а удобным математическим инструментом, позволяющим избежать интегрирования в бесконечных

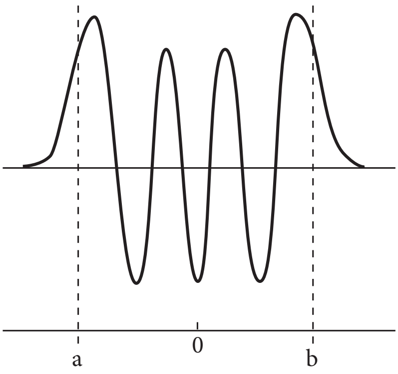

Рис. 3.12: Квазиклассическая волновая функция в связанном состоянии между точками поворота

пределах и правильно сосчитать квантовые уровни. Вычисления можно проверить на предмет того, что физические результаты не должны зависеть от искусственно введённого объёма V.

3.9 Считаем уровни в гладком потенциале

Если частица имеет связанные состояния не в свободном пространстве внутри ящика, а в потенциале $U(\mathbf{r})$, то также можно, обобщая наш предыдущий подход, оценить плотность уровней. Предположим, что потенциал достаточно гладкий и слабо меняется на размерах порядка длины волны частицы (рис. 3.12). Позже мы дадим более количественные оценки применимости этого подхода. Очевидно, что такой подход лучше работает для больших квантовых чисел, когда энергия частицы растёт, а её длина волны становится короче. Это, как мы уже отмечали, область *квазиклассического движения* или аналог *геометрической оптики*.

В этой ситуации мы можем предположить, что элемент фазового объёма $d^3r\, d^3p$ достаточно мал для того, чтобы классическая энергия частицы

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \tag{3.100}$$

была практически константой в пределах этого элемента. В тоже время рассматриваемый объём должен содержать несколько длин волн, определяемых *локальными* значениями импульса. Тогда по аналогии с (3.94) этот элемент соответствует числу $d^3r\, d^3p/(2\pi\hbar)^3$ квантовых состояний, а полная

плотность уровней определяется обобщением выражения (3.90):

$$\rho(E) = \int \frac{d^3r\, d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, \delta\Big(E - \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})\Big). \tag{3.101}$$

При отсутствии потенциала в области интегрирования энергия (3.100) не зависит от координаты, поэтому интеграл $\int d^3r$ сводится к объёму V и мы возвращаемся к выражению (3.88).

Откладывая интегрирование по координатам, мы может сначала вычислить *локальную плотность уровней*, соответствующую данной координате:

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, \delta\Big(E - \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})\Big). \tag{3.102}$$

Эта величина может быть вычислена так же, как было сделано ранее (3.91), с помощью замены полной энергии на локальную кинетическую:

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} \left(\frac{p^2}{v}\right)_{\varepsilon_{\mathrm{kin}}(E,\mathbf{r}) = E - U(\mathbf{r})} = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{2m^3[E - U(\mathbf{r})]}. \tag{3.103}$$

Это квазиклассическое выражение обращается в нуль в классической *точке поворота*, где $E = U(\mathbf{r})$. Мы не можем продолжить эту плотность уровней далее в классически запрещённую область, где $U(\mathbf{r}) > \varepsilon$. Однако если частью плотности снаружи ямы можно пренебречь (это можно сделать не всегда), то полная плотность уровней может быть найдена интегрированием (3.103) по области классического движения:

$$\rho(E) = \int d^3r\, \rho(\mathbf{r}, E) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_{E \geqslant U(\mathbf{r})} d^3r\, \sqrt{E - U(\mathbf{r})}. \tag{3.104}$$

Задача 3.10

Найти квазиклассическую плотность уровней для частицы в поле изотропного трёхмерного гармонического осциллятора

$$U(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2. \tag{3.105}$$

Решение.

Плотность уровней растёт $\sim E^2$, как и в случае фотонов (3.92):

$$\rho(E) = \frac{E^2}{2(\hbar\omega)^3}. \tag{3.106}$$

Задача 3.11

Обобщите результат (3.106) на случай *анизотропного* трёхмерного осциллятора

$$U(\mathbf{r}) = \frac{m}{2}\,(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2). \tag{3.107}$$

Решение.

Воспользуемся *растянутой* системой координат $\xi_i = \omega_i x_i$, $i = x, y, z$, и найдём

$$\rho(E) = \frac{E^2}{2\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z}. \tag{3.108}$$

Дальнейшее интегрирование плотности уровней по энергии даст полное число связанных состояний (3.86). Например, предполагая, что притягивающий потенциал является отрицательным везде и на больших расстояниях асимптотически стремится к нулю, мы можем оценить полное число связанных состояний интегрируя $\rho(E)$ по всем дозволенным отрицательным энергиям:

$$\mathcal{N}_b = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int d^3r \int_{U(\mathbf{r})}^{0} dE\,\sqrt{E - U(\mathbf{r})} = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int d^3r\,[-U(\mathbf{r})]^{3/2}. \tag{3.109}$$

Задача 3.12

Предполагая, что потенциал $U(r)$ имеет *центральную симметрию* (нет зависимости от углов) и асимптотическое поведение $\sim 1/r^s$, $s > 0$ при $r \to \infty$, найдите, является ли полное число связанных состояний конечным.

Решение.

Ответ зависит от поведения интеграла $\int d^3r\, r^{-(3/2)s}$ на больших r. Интеграл расходится для $s < 2$. Тогда число уровней бесконечно (потенциал спадает слишком медленно, как, например, в случае кулоновского потенциала, $s = 1$, спектр становится бесконечно плотным вблизи порога нулевой энергии $E = 0$, а соответствующие волновые функции имеют очень большой размер). Однако это не квантовое гало, так как волновая функция спадает быстрее, чем потенциал, и движение происходит в классически разрешённой области. Для $s > 2$ полное число связанных состояний конечно.

Мир — это изменение...
Маркус Аврéлий Антонúн,
«Размышления IV.3».

Глава 4

Динамические переменные

4.1 Импульсное представление

Реальный физический источник не в состоянии создать чистый монохроматический поток частиц. Реальные квантовые волны всегда имеют некоторый разброс импульса Δp и соответствующий разброс по энергии.

Необходимо обратить внимание, что мы обсуждаем волновую функцию одной частицы, а не энергетический разброс среди частиц в пучке; «пучок» используется здесь только для того, чтобы была возможность повторять эксперимент при тех же условиях. Серия таких измерений выявляет *вероятность* — частоту появления конкретного результата измерения, характеризующего состояние отдельной частицы.

Начальную волновую функцию свободного и для простоты одномерного движения с некоторой неопределённостью импульса и энергии можно представить, например, в момент времени $t = 0$ в виде *волнового пакета*:

$$\Psi(x, t = 0) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \Phi(p) e^{(i/\hbar)px}, \tag{4.1}$$

где $\Phi(p)$ — амплитуды плоских волн, собранных в пакет. Множитель $(2\pi\hbar)^{-1}$ добавлен, чтобы сделать будущую нормировку более удобной. Во время последующей эволюции системы каждая составная часть пакета распространяется с ее собственной частотой $E(p)/\hbar$, определяемой законом дисперсии $E(p)$. В момент времени t волновой пакет представляет собой суперпозицию исходных компонент с той же амплитудой $\Phi(p)$, но с другими, зависящими от времени фазами:

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \Phi(p) e^{(i/\hbar)[px - E(p)t]}. \tag{4.2}$$

Многообразие накопленных компонентами волнового пакета фаз приводит к *интерференционной картине*, которая развивается во времени.

Утверждение, согласно которому амплитуды $\Phi(p)$ не меняются со временем, означает, что при свободном движении импульс сохраняется, даже если он не имеет определённого значения в приготовленном квантовом состоянии типа пакета. Импульс частицы может быть измерен, например, с помощью эффекта Комптона или каким-либо другим способом. При любом акте регистрации определяется только одно из значений, которые представлены в исходной суперпозиции (4.1) и сохраняются без изменений в процессе невозмущённой эволюции. Измерение импульса производит *разложение* распространяющегося волнового пакета на составляющие. Амплитуды $\Phi(p)$ интерпретируются как *амплитуды вероятности* нахождения импульса в небольшом интервале dp около значений импульса p. Чем больше вероятность

$$w(p)\,dp \propto |\Phi(p)|^2 dp, \tag{4.3}$$

тем чаще значение p будет регистрироваться при измерении.

Набор амплитуд $\Phi(p)$ несёт ту же информацию, что и начальная координатная волновая функция $\Psi(x)$. Действительно, выражение (4.1) просто означает, что мы выполняем *Фурье-анализ* волнового пакета. Как известно из теории интегралов Фурье: для «хорошей» (не очень сингулярной) функции $\Psi(x)$ обратное преобразование определяет Фурье-образ изначальной функции волнового пакета

$$\Phi(p) = \int dx\,\Psi(x)e^{-(i/\hbar)px}. \tag{4.4}$$

Часто преобразования (4.1) и (4.4) записываются в симметричной форме с коэффициентом $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ (или $(2\pi\hbar)^{-3/2}$ для трёхмерного движения с интегрированием по d^3p в выражениях (4.1) и (4.2)) в обоих выражениях и для импульса, и для координаты. Мы предпочитаем собрать эти коэффициенты в определении координатного волнового пакета (4.1) по аналогии с принятыми ранее в разделе 3.7 соглашениями. Для доказательства справедливости выражения (4.4) достаточно подставить его обратно в определение (4.1) и использовать представление дельта-функции через интеграл (3.25), которое формулирует условие полноты (3.16) для набора плоских волн.

Задача 4.1

Пучок частиц с законом дисперсии $E(p)$ расщепляется при $t = 0$ на два волновых пакета

$$\Psi(x, t = 0) = \psi_a(x) + \psi_b(x). \tag{4.5}$$

Начальное *перекрытие* пакетов определяется как

$$\Theta_{ab}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x). \tag{4.6}$$

Волновые пакеты движутся в бесконечном пространстве вдоль оси x. Найдите, как зависит от времени перекрытие $\Theta_{ab}(t)$.

Решение.

Эволюция во времени перекрытия определяется через импульсные волновые функции $\varphi_{a,b}(p)$ (4.2):

$$\begin{aligned}\Theta_{a,b} = \int dx \left\{ \int \frac{dp_a}{2\pi\hbar}\, \varphi_a(p_a) e^{(i/\hbar)[p_a x - E(p_a)t]} \right\}^* \times \\ \times \left\{ \int \frac{dp_b}{2\pi\hbar}\, \varphi_b(p_b) e^{(i/\hbar)[p_b x - E(p_b)t]} \right\}.\end{aligned} \tag{4.7}$$

Интеграл по координате x, равный $2\pi\hbar\delta(p_a - p_b)$, аннулирует все интерференционные вклады, включая временную зависимость за исключением когерентных по пространственной фазе. Используя дельта-функцию и интегрируя по одному из волновых векторов, получаем

$$\Theta_{ab}(t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \varphi_a^*(p)\varphi_b(p) = \Theta_{ab}(0). \tag{4.8}$$

Перекрытие остаётся неизменным, потому что при свободном движении каждая из импульсных компонент движется независимо в соответствии с её импульсом и энергией. Только взаимно когерентные волны интерферируют в бесконечном пространстве, а они имеют одинаковые зависящие от энергии фазы. В любое время перекрытие точно так же выражается через координатную волновую функцию $\psi_{a,b}(x)$ (4.6) или через её импульсный аналог $\varphi_{a,b}(p)$ (4.8).

Вся эта процедура аналогична той, которую мы обсуждали для частицы в потенциальной ящике в разделе 3.2. В обоих случаях мы используем набор стационарных состояний (состояний с определённой энергией и поэтому с чисто гармонической временной зависимостью), как полный набор

базисных функций. Любая возможная волновая функции в данной системе может быть представлена в виде линейной комбинации базисных функций. Комбинация может быть дискретной (ряд Фурье) для связанных состояний в потенциальном ящике или непрерывной (интеграл Фурье) для волновых пакетов. Это различие не является существенным, так как свободное движение можно также рассматривать по примеру раздела 3.8, как движение в большом нормировочном объёме, когда квантование делает спектр импульса и энергии дискретным, хотя и очень плотным. Набор базисных функций полон в обоих случаях. Для волновых пакетов условие полноты — аналог выражения (3.16) — выглядит как в (3.25):

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)px} (e^{(i/\hbar)px'})^* = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)p(x-x')} = \delta(x-x'). \tag{4.9}$$

Аналогично дискретному набору коэффициентов f_n в выражении (3.32) для волновой функции в энергетическом представлении мы можем назвать амплитудную функцию $\Phi(p)$ волновой функцией в *импульсном представлении.* Опять следует подчеркнуть, что обе, координатная и импульсная, волновые функции содержат одну и ту же физическую информацию и могут быть использованы для описания системы как альтернативы. Так как при свободном движении сохраняется импульс и его величина определяет энергию, то импульсное представление совпадает с энергетическим представлением и зависит от времени как

$$\Phi(p,t) = \Phi(p,0)e^{-(i/\hbar)E(p)t}. \tag{4.10}$$

Как следует из (4.6) и (4.8), если координатная функция нормирована в соответствии с (2.6), то соответствующая импульсная волновая функция также нормирована:

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \Phi^*(p)\Phi(p) = 1. \tag{4.11}$$

Аналогично ортогональность (2.11) функций $\Psi(x)$ и $\Psi'(x)$ влечет ортогональность их импульсных представлений $\Phi(p)$ и $\Phi'(p)$.

4.2 Знакомство с операторами

Если мы интерпретируем $|\Psi(x)|^2$ как плотность вероятности обнаружения частицы около точки x (здесь мы фиксируем время и не отмечаем явно этот факт, хотя измерение в другой момент времени t в общем случае

даёт другой результат), то результат многих идентичных измерений будет давать *среднее значение* координаты в заданных условиях (сравните с распределением Гаусса (3.22)):

$$\langle x\rangle = \int dx\, x|\Psi(x)|^2. \tag{4.12}$$

Аналогично среднее значение импульса определяется импульсной волновой функцией:

$$\langle p\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, p\,|\Phi(p)|^2. \tag{4.13}$$

Мы называем такие средние величины *математическими ожиданиями.*

В силу утверждения, что координатное и импульсное представления несут одну и ту же информацию, должно быть возможным нахождение среднего значения координаты непосредственно из импульсной волновой функции, а математическое ожидание импульса непосредственно из координатной волновой функции. Можно получить такой алгоритм с помощью выражения (4.4), которое при подстановке в (4.13) приводит к

$$\langle p\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,|\Phi(p)|^2 p = \int dx\, dx'\, \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)px} p e^{-(i/\hbar)px'}\,\Psi^*(x)\Psi(x'). \tag{4.14}$$

Интеграл по p может быть представлен как

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar}\left(-i\hbar\,\frac{d}{dx}\right) e^{(i/\hbar)p(x-x')} = \left(-i\hbar\,\frac{d}{dx}\right)\delta(x-x'), \tag{4.15}$$

а затем интегрирование по x' даёт итоговый ответ:

$$\langle p\rangle = \int dx\,\Psi^*(x)\left(-i\hbar\,\frac{d}{dx}\right)\Psi(x). \tag{4.16}$$

Таким образом, координатное представление $\Psi(x)$ позволяет предсказать математическое ожидание и для координаты, и для импульса.

Результат (4.12) может быть переписан аналогично выражению (4.16):

$$\langle x\rangle = \int dx\,\Psi^*(x)\, x\,\Psi(x). \tag{4.17}$$

Аналогично мы можем выразить оба средних значения и в терминах импульсной волновой функции:

$$\langle p \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \Phi^*(p)\, p\, \Phi(p), \tag{4.18}$$

$$\langle x \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \Phi^*(p) \left(i\hbar \frac{d}{dp} \right) \Phi(p). \tag{4.19}$$

Видно, что в координатном (импульсном) представлении координата (импульс) появляется в виде множителя, тогда как в *сопряжённом* импульсном (координатном) представлении они становятся дифференциальными *операторами.*

Задача 4.2

Чему равно отношение средних значений импульса $\langle p_x \rangle_1 / \langle p_x \rangle_2$ для двух возможных состояний одной частицы $\psi_1(x) = \exp(ikx - \alpha x^2)$ и $\psi_2(x) = \exp(ikx - 2\alpha x^2)$, где k и $\alpha > 0$ — вещественные константы?

Решение.

С помощью прямых вычислений мы получаем, что средние значения импульсов одинаковы и равны $\langle p \rangle = \hbar k$. Это частный случай более общего утверждения из главы 7, которое связывает поток вероятности с *градиентом фазы* волновой функции.

Легко повторить наши выводы для динамической переменной, которая является функцией координаты или функцией импульса. Например, для среднего значения $\langle K \rangle$ кинетической энергии $K(p) = p^2/2m$ мы пойдём по пути уравнений (4.13)–(4.16), начиная с выражения

$$\langle K \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \frac{p^2}{2m} |\Phi(p)|^2 \tag{4.20}$$

и заканчивая выражением

$$\langle K \rangle = \int dx\, \Psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi(x). \tag{4.21}$$

Мы приходим к выводу, что любое среднее значение может быть выражено с помощью *оператора*, определённого по-разному для любого конкретного (координатного или импульсного) представления, но с результатом, не зависящим от представления. В общем случае для динамической переменной $\mathcal{O}$ введём оператор $\hat{\mathcal{O}}$ (помеченный «шляпкой») таким образом, что

среднее значение этой величины в любом представлении волновой функции Ψ может быть записано как

$$\langle\mathcal{O}\rangle \equiv \frac{\int d\tau \Psi^* \hat{\mathcal{O}} \Psi}{\int d\tau \Psi^* \Psi} \Rightarrow \int d\tau \Psi^* \hat{\mathcal{O}} \Psi, \tag{4.22}$$

где $\int d\tau$ означает интегрирование по всем переменным представления, выбранного для волновой функции. Первое выражение (4.22) не предполагает какой-либо нормировки волновых функций, в то время как второе применимо только к нормированному случаю, как это было принято в (4.12) и далее. В будущем, как правило, мы будем предполагать, что наши волновые функции нормированы.

Позже мы будем иметь дело с более общими величинами, а именно с *матричными элементами*, которые похожи на средние значения, но где левое и правое состояние под интегралом могут быть разными по примеру перекрытия в задаче 4.1. Мы будем использовать удобные «бра-кет» *обозначения Дирака* $\langle\Psi|\hat{\mathcal{O}}|\Psi'\rangle$, которые состоят из *бра-вектора* (комплексно сопряжённая функция Ψ^*), оператора и *кет-вектора* (функция Ψ'):

$$\langle\Psi|\hat{\mathcal{O}}|\Psi'\rangle \equiv \int d\tau \Psi^* \, \hat{\mathcal{O}} \, \Psi'. \tag{4.23}$$

Такие величины формируют *матрицу* в общем случае бесконечномерную, где строки и столбцы соответствуют всевозможным состояниям Ψ и Ψ'. Для средних значений, $\Psi' = \Psi$, мы иногда будем использовать термин *диагональный* матричный элемент, в то время как в случае разных функций матричный элемент будет называться *недиагональным.* Позже мы обсудим более общие алгебраические и физические значения матричных элементов — они определяют *амплитуды перехода* между состояниями Ψ' и Ψ. В следующей таблице мы подводим итоги наших изысканий для операторов координаты и импульса:

Представление	Оператор координаты	Оператор импульса
Координата	x	$-i\hbar\,(d/dx)$
Импульс	$i\hbar\,(d/dp)$	p

4.3 Коммутаторы

Аналогично кинетической энергии (4.20) для любой функции координат $f(x)$ или импульса $g(p)$ можно получить оператор умножения в собственном

представлении, в то время как в сопряжённых представлениях

$$f(x) \Rightarrow \hat{f} = f(i\hbar\, d/dp), \quad g(p) \Rightarrow \hat{g} = g(-i\hbar\, d/dx). \tag{4.24}$$

Однако такое соответствие между классическими динамическими переменными и квантовыми операторами не всегда однозначно. Например, в качестве оператора произведения координаты и импульса можно взять или $\hat{x}\hat{p}$, или $\hat{p}\hat{x}$, но это даёт *разные* результаты:

$$\hat{x}\hat{p}\Psi = -i\hbar\, x\,\frac{d\Psi}{dx}, \quad \hat{p}\hat{x}\Psi = -i\hbar\frac{d(x\Psi)}{dx}. \tag{4.25}$$

В таких случаях важен *порядок* следования соответствующих операторов. Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ являются некоммутирующими, если результат их действия зависит от порядка, иначе же операторы *коммутируют*. Оператор, соответствующий такой разнице, называется *коммутатором*:

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -[\hat{B},\hat{A}]. \tag{4.26}$$

В частности,

$$[\hat{x},\hat{p}]\Psi = -i\hbar\left\{x\,\frac{d\Psi}{dx} - \frac{d(x\Psi)}{dx}\right\} = i\hbar\Psi, \tag{4.27}$$

т. е. коммутатор координатного и импульсного оператора — это мнимая константа (естественно, не зависящая от представления):

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar. \tag{4.28}$$

Обобщение на многомерный случай с множеством координат x_i и соответствующих им сопряжённых импульсов p_i делается непосредственно: в координатном представлении оператор импульса — это многомерный градиент:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \tag{4.29}$$

и

$$[\hat{x}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{4.30}$$

Координатные (или импульсные) операторы, соответствующие разным степеням свободы, всегда коммутируют.

Задача 4.3

Докажите следующие тождества:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \tag{4.31}$$

и

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \tag{4.32}$$

(*Тождество Якоби*). Важно соблюдать цикличность перестановки операторов.

Задача 4.4

Доказать

$$[\hat{x}, g(\hat{p})] = i\hbar \frac{dg}{d\hat{p}}, \quad [\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar \frac{df}{d\hat{x}}. \tag{4.33}$$

Задача 4.5

а) Введите безразмерный оператор *орбитального момента* или момента импульса (в единицах $\hbar$) для случая трёхмерного движения как

$$\hat{\vec{\ell}} = \frac{1}{\hbar}[\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] = -i[\hat{\mathbf{r}} \times \nabla] \tag{4.34}$$

и докажите, что коммутаторы его декартовых координат $\hat{\ell}_i$ с $\hat{x}_j$ — координатами радиус-вектора $\hat{\mathbf{r}}$, с $\hat{p}_j$ — координатами вектора импульса и друг с другом равны:

$$[\hat{\ell}_i, \hat{x}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k, \tag{4.35}$$

$$[\hat{\ell}_i, \hat{p}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k, \tag{4.36}$$

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{\ell}_k. \tag{4.37}$$

Здесь и далее в схожих случаях по умолчанию предполагается суммирование по повторяющимся индексам. ε_{ijk} — абсолютно антисимметричный тензор третьего ранга. Он меняет знак при перестановке любых двух индексов. Свойства ε_{ijk}:

$$\varepsilon_{xyz} = \varepsilon_{yzx} = \varepsilon_{zxy} = -\varepsilon_{yxz} = -\varepsilon_{xzy} = -\varepsilon_{zyx} = 1. \tag{4.38}$$

Также докажите следующие свойства свёрток этого тензора:

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{lmk} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{lj}, \quad \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ljk} = 2\delta_{li}, \quad \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} = 6. \tag{4.39}$$

Схожий характер коммутаторов (4.35–4.37) имеет глубокий геометрический смысл (II том глава 1). Результат будет тем же и для коммутатора

$$[\hat{\ell}_i, \hat{v}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{v}_k \tag{4.40}$$

с любым пространственным *вектором* $\hat{\mathbf{v}}$ и фактически может служить определением *векторного оператора*.

б) Покажите, что для любых двух векторов $\hat{\mathbf{v}}$ и $\hat{\mathbf{u}}$ оператор орбитального момента коммутирует со скалярным произведением $(\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{u}}) = \hat{v}_x\hat{u}_x + \hat{v}_y\hat{u}_y + \hat{v}_z\hat{u}_z$. Позже мы увидим, что этот факт отражает инвариантность скалярного произведения относительно вращения, так как орбитальный момент, как и в классической механике, связан со вращением (раздел 4.7).

4.4 Собственные функции и собственные значения

Для любого оператора физической величины мы можем найти специальные состояния, где эти величины имеют *определённые значения*. Волновая функция состояния с фиксированным значением x_0 координаты x (*локализованное* состояние) в координатном представлении равна

$$\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \tag{4.41}$$

Любые другие состояния $\Psi(x)$ описываются размытым распределением координат с вероятностью $|\Psi(x)|^2$. Аналогично волновая функция с определённым значением импульса p_0 в импульсном представлении имеет вид

$$\Phi_{p_0}(p) = 2\pi\hbar\,\delta(p - p_0), \tag{4.42}$$

где дополнительный множитель взят для правильной нормировки, хотя в данном случае это особого значения не имеет. Индексы x_0 и p_0 здесь означают *квантовое число* состояния, в то время как x и p — это *переменные*. Мы можем охарактеризовать те же состояния в сопряжённых представлениях:

$$\Phi_{x_0}(p) = \int dx\, e^{-(i/\hbar)px}\, \delta(x - x_0) = e^{-(i/\hbar)px_0}, \tag{4.43}$$

$$\Psi_{p_0}(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{(i/\hbar)px}\, 2\pi\hbar\,\delta(p - p_0) = e^{(i/\hbar)p_0x}. \tag{4.44}$$

Очевидно, что в последнем случае координатная волновая функция — это плоская волна с импульсом p_0.

Обратим внимание на два обстоятельства. Во-первых, состояние (4.41) с фиксированной координатой частицы имеет импульсную функцию вероятности $|\Phi_{x_0}(p)|^2 = 1$, распределённую однородно по всему импульсному пространству. Значение импульса абсолютно не определено, соответственно, при измерении импульса можно получить любое его значение с одинаковой

вероятностью. Аналогично состояние (4.42) с фиксированным импульсом или плоская волна, распределённая по всему координатному пространству, имеет абсолютно неопределённую координату, так как $|\Psi_{p_0}(x)|^2 = 1$. Это яркий пример *соотношения неопределённостей*, которое будет подробно обсуждаться в главе 5. Конечно, эти состояния являются предельными случаями, не существующими в реальных физических ситуациях.

Во-вторых, мы можем заметить, что все эти состояния имеют специальные математические свойства, т. е. они не меняются при действии соответствующих операторов. Для координатно локализованного состояния (4.35)

$$\hat{x}\delta(x - x_0) = x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0), \tag{4.45}$$

где второе равенство следует из определения дельта-функции как интегрального оператора, который вырезает только конкретную точку в области интегрирования. Аналогичное свойство верно и для импульсного представления (4.42):

$$\hat{x}\Phi_{x_0}(p) = i\hbar \frac{d}{dp}\,\Phi_{x_0}(p) = x_0\Phi_{x_0}(p). \tag{4.46}$$

Независимо от представления действие оператора на волновую функцию состояния, где эта величина имеет конкретное значение, сводится к умножению волновой функции на это значение. Такие состояния называются *собственными состояниями* данного оператора. Их волновые функции, соответственно, называются *собственными функциями*, а соответствующие значения переменной — *собственными значениями*. Поэтому локализованные состояния — это собственные состояния оператора координаты, в то время как плоская волна — это собственное состояние оператора импульса. В этих случаях средние значения величин — это просто их собственные значения:

$$\int dx\,\Psi^*_{x_0}(x)\hat{x}\Psi_{x_0}(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,\Phi^*_{x_0}(p)\hat{x}\Phi_{x_0}(p) = x_0. \tag{4.47}$$

4.5 Импульс как генератор сдвига

Существует большая свобода в выборе системы координат. Мы можем перенести начало координат, повернуть оси, изменить масштаб и т. д. Несмотря на то что такие преобразования могут выглядеть формальными, они важны по двум причинам. Во-первых, в новых координатах описание

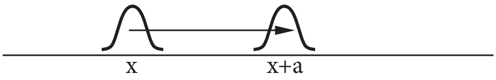

Рис. 4.1: Смещение волновой функции

физической системы может оказаться более простым и более прозрачным. Второй и очень важный аспект состоит в том, что преобразования могут выявить *симметрии* системы. Идея симметрии является одной из самых важных в области теоретической физики и особенно в квантовой механике, где мы постоянно сталкиваемся с понятиями симметрии. Начнём с введения простейших преобразований, а именно со *сдвига*.

Возьмём состояние, описываемое волновой функцией $\psi(x)$, и сдвинем этот квантовый объект на расстояние a вдоль оси x. Обозначим оператор, выполняющий это смещение, как $\hat{\mathcal{D}}(a)$. Можно легко определить явный вид этого оператора и найти его связь с операторами, введёнными ранее. Этот вывод будет прототипом для более сложных случаев.

Геометрическая картинка смещения на рис. 4.1 означает, что волновой пакет просто сдвинулся без каких-либо искажений. Например, объект, локализованный ранее в точке $x = x_0$, теперь будет локализован в точке $x = x_0 + a$:

$$\psi(x) = \delta(x - x_0) \quad \rightarrow \quad \psi'(x) = \delta(x - x_0 - a), \tag{4.48}$$

т. е. новая функция — это просто старая функция, взятая с аргументом $(x - a)$. Легко видеть, что это верно и для любой волновой функции: в точке x после сдвига мы увидим то же значение функции, которое было до сдвига в точке $(x - a)$. Поэтому оператор сдвига действует следующим образом:

$$\hat{\mathcal{D}}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x - a). \tag{4.49}$$

Здесь мы можем использовать тот факт, что сдвиг зависит от *непрерывного* параметра a, который может быть выбран бесконечно малым, $a \to \delta a$. Для любых непрерывных функций

$$\hat{\mathcal{D}}(\delta a)\psi(x) = \psi(x - \delta a) \approx \psi(x) - \delta a\,\frac{d\psi}{dx}, \tag{4.50}$$

где производная взята в точке начального положения. Это означает, что:

$$\hat{\mathcal{D}}(\delta a) = 1 - \delta a \, \frac{d}{dx} \tag{4.51}$$

и это может быть выражено с помощью оператора импульса:

$$\hat{\mathcal{D}}(\delta a) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta a \, \hat{p}, \tag{4.52}$$

Оператор, производящий бесконечно малое преобразование, называется *генератором* этого преобразования. Отсюда следует, что *импульс* — это *генератор сдвига*, и этот факт может использоваться как основное определение импульса.

Для того чтобы перейти к *конечному* сдвигу, мы делим полное расстояние a на N маленьких фрагментов длиной $\delta a = a/N$ и делаем N последовательных малых сдвигов, умножая N раз генератор (4.52). В пределе $N \to \infty$

$$\hat{\mathcal{D}}(a) = \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar}\,\frac{a}{N}\,\hat{p}\right)^N. \tag{4.53}$$

Этот предел даёт экспоненту от оператора импульса:

$$\hat{\mathcal{D}}(a) = e^{-(i/\hbar)a\hat{p}}. \tag{4.54}$$

Другой способ получения этого результата — это использование ряда Тэйлора вместо функции (4.49):

$$\psi(x - a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!}\,\frac{d^n}{dx^n}\,\psi(x) = e^{-a(d/dx)}\psi(x) = e^{-(i/\hbar)a\hat{p}}\,\psi(x). \tag{4.55}$$

Важным элементом этих рассуждений является тот факт, что разные сдвиги содержат один и тот же оператор $\hat{p}$ и потому *коммутируют*. Обобщение для трёхмерного случая очевидно:

$$\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{a}) = e^{-(i/\hbar)a_x\hat{p}_x}\, e^{-(i/\hbar)a_y\hat{p}_y}\, e^{-(i/\hbar)a_z\hat{p}_z} = e^{-(i/\hbar)(\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}})}, \tag{4.56}$$

где мы можем объединить сдвиги вдоль x, y и z, потому что сдвиги вдоль разных осей генерируются разными компонентами импульса и, соответственно, коммутируют:

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \tag{4.57}$$

Среднее значение координаты для сдвинутого состояния, в соответствии с понятием сдвига, равно

$$\begin{aligned}\langle x\rangle_{\psi'} &= \int dx\,\psi'^*(x)x\psi'(x) = \int dx\psi^*(x-a)x\psi(x-a)\\ &= \int dx'\,\psi^*(x')(x'+a)\psi(x') = \langle x\rangle_\psi + a,\end{aligned} \tag{4.58}$$

где предполагается, что исходные функции $\psi(x)$ нормированы на 1. Можно также переопределить координатный оператор таким образом, чтобы результат измерения координаты остался бы после сдвига таким же, как и до сдвига. Ясно, что для этого достаточно создать новый оператор, который следует за преобразованием волновой функции:

$$\hat{x} \to \hat{x}' = \hat{x} - a, \tag{4.59}$$

$$\langle x'\rangle_{\psi'} = \int dx\,\psi^*(x-a)\hat{x}'\psi(x-a) = \langle x\rangle_\psi. \tag{4.60}$$

Стоит также отметить, что плоская волна после сдвига приобретает только фазу, как следует из вида волны в бесконечном пространстве:

$$\hat{\mathcal{D}}(a)\psi_{p_0}(x) = \psi_{p_0}(x-a) = e^{(i/\hbar)p_0(x-a)} = e^{-(i/\hbar)p_0 a}\psi_{p_0}(x). \tag{4.61}$$

Это важно для квантовой теории кристаллов, где есть симметрия относительно сдвига на целое число периодов решётки (глава 8).

4.6 Введение в теорию групп*

С математической точки зрения сдвиги $\hat{\mathcal{D}}(a)$ образуют *непрерывную группу*. В общем случае группа — это набор элементов $\{g\}$, имеющих стандартные свойства: *бинарная операция умножения* определена таким образом, что для каждой упорядоченной пары элементов g_1g_2 существует элемент g_3, называемый их *произведением*, который может быть записан как $g_1g_2 = g_3$; эта операция *ассоциативна*, $g_1(g_2g_3) = (g_1g_2)g_3$; существует *единичный элемент 1*, такой что $g1 = 1g = g$; для каждого элемента g существует *обратный элемент* g^{-1}, такой что $gg^{-1} = 1$. Легко видеть, что $(gf)^{-1} = f^{-1}g^{-1}$.

Задача 4.6

Построить возможные таблицы умножения для групп, которые содержат два и три элемента.

Решение.

В обоих случаях результат будет уникальным: все группы из $n = 2$ элементов *изоморфны* и все группы из $n = 3$ элементов также изоморфны. При $n = 2$ группа содержит элементы 1 и g, причём $g^2 = 1$. Этот пример соответствует группе инверсии координат, когда $g = \hat{\mathcal{P}}$ — оператор инверсии.

Для $n = 3$ у нас есть элементы g, g^{-1} и 1 с единственно возможными нетривиальными правилами умножения:

$$gg = g^{-1}, \quad g^{-1}g^{-1} = g. \tag{4.62}$$

Примером может служить плоское вращение равностороннего треугольника на 120°, 240° и 360°. В обоих случаях $n = 2$ и $n = 3$ соответствуют *циклическим* группам, которые состоят из элементов $g, g^2, ..., g^{n-1}$. Для всех групп с конечным числом элементов n $g^n{=}1$ для любого элемента g.

Очевидно, все сдвиги в евклидовом пространстве любой размерности образуют группу. Умножение двух сдвигов $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{a}_1)$ и $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{a}_2)$ — это их последовательное действие, которое эквивалентно сдвигу на вектор $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ и соответствует их сумме в обычном смысле векторной алгебры. Единичный элемент — это «сдвиг» на $\mathbf{a} = 0$, а обратный сдвиг:

$$\left(\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{a})\right)^{-1} = \hat{\mathcal{D}}(-\mathbf{a}). \tag{4.63}$$

Эта группа является *непрерывной*, так как его элементы определяются непрерывным изменением параметров $\mathbf{a}$. Это позволяет ввести *генераторы* $\hat{\mathbf{p}}$. Группа называется *абелевой* или *коммутативной*, если, как в данном случае, генераторы коммутируют друг с другом или в общем случае $g_1g_2 = g_2g_1$, т. е. таблица умножения симметрична.

В квантовой механике мы часто имеем дело с группами, элементами которых являются *преобразования* физических систем. Под действием группы преобразования каждое состояние переходит в другое состояние той же системы, а операция умножения определяется как результат двух последовательных преобразований. Множество объектов, т. е. волновых функций, которые преобразуются только между собой под действием *всех* элементов группы, образует *представление* группы. Если нет меньшего подмножества внутри этого множества, которое может сформировать представление, то представление называется *неприводимым*. Любая «хорошая» функция может быть разложена в интеграл Фурье так, что достаточно рассмотреть преобразование плоской волны (4.61). Плоские волны явля-

ются собственными функциями для всех сдвигов — каждая плоская волна формирует неприводимое одномерное представление группы сдвигов. Это общее свойство абелевых групп — их неприводимые представления являются одномерными и определяются общими собственными функциями всех коммутирующих генераторов.

Нужно также отметить, что здесь и далее мы используем *активное* описание преобразования, т. е. преобразуем систему. Другой, эквивалентный, подход использует *пассивное* описание преобразования, т. е. когда преобразуется система координат, используемая для описания системы. В случае сдвига мы можем сдвинуть начало координат вдоль оси x на $-a$, что даст новое положение объекта на расстоянии $x + a$ как будто после активного сдвига на a. В этом описании роли операторов $\hat{\mathcal{D}}$ и $\hat{\mathcal{D}}^{-1}$ поменялись местами.

4.7 Момент импульса как генератор вращения

Аналогично сдвигу мы можем рассмотреть *вращения* системы *вокруг заданной оси*. Если выбрать ось z в качестве оси вращения, то в плоскости xy удобно использовать полярные координаты (ρ, φ):

$$x = \rho\cos\varphi, \quad y = \rho\sin\varphi. \tag{4.64}$$

Совершим в этой плоскости вращение системы на угол α (положительное вращение против часовой стрелки), рис. 4.2. Повторяя те же рассуждения, что и для сдвига, преобразуем волновую функцию как

$$\psi(\rho, \varphi) \to \psi'(\rho, \varphi) = \psi(\rho, \varphi - \alpha). \tag{4.65}$$

Соответствующий оператор вращения обозначим $\hat{\mathcal{R}}_z(\alpha)$, где индекс z обозначает ось вращения. Из выражения (4.65) по аналогии с (4.48) находим, что

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\alpha)\psi(\varphi) = \psi(\varphi - \alpha), \tag{4.66}$$

где мы опустили переменные, не затронутые вращением.

Опять у нас есть непрерывный параметр — угол поворота α, и с ним мы проделываем те же действия, что были проделаны со сдвигом. Введём *бесконечно малый* поворот на угол $\delta\alpha$ и найдём соответствующий оператор:

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\delta\alpha) = 1 - \delta\alpha\,\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{4.67}$$

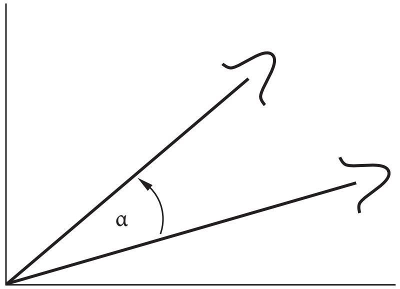

Рис. 4.2: Вращение волновой функции

Отсюда соответствующий генератор пропорционален производной по углу $\partial/\partial\varphi$ или z-компоненте *момента импульса* (4.34). Переходя к полярным координатам (4.64), легко получить:

$$\hat{\ell}_z = \frac{1}{\hbar}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = -i\,\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad \rightsquigarrow \quad \hat{R}_z(\delta\alpha) = 1 - i\delta\alpha\cdot\hat{\ell}_z. \tag{4.68}$$

Для вращения на конечный угол α мы восстанавливаем полный оператор в экспоненциальной форме:

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\alpha) = e^{-i\alpha\hat{\ell}_z}. \tag{4.69}$$

Здесь аналогия между вращением и сдвигом заканчивается. В трёхмерном пространстве у нас есть три независимых плоскости вращения, и соответствующие генераторы являются компонентами $\hat{\ell}_i$ момента импульса, направленными вдоль осей вращения перпендикулярно этим плоскостям. В отличие от компонент $\hat{\mathbf{p}}$ генераторы вращения вокруг различных осей $\hat{\ell}_i$ не коммутируют (4.37). Операторы вращения образуют группу вращений *R(3)* в трёхмерном пространстве, но эта группа *неабелева*. Важные следствия этого факта будут обсуждаться в первой главе второго тома. Разница существует и для двумерного случая. Группа *R(2)* является абелевой и имеет только один генератор (вращение в плоскости). Принимая ось z в качестве оси вращения, находим собственные функции $\psi_m(\varphi)$ оператора $\hat{l}_z$ с собственными значениями, обозначенными числом m:

$$\hat{\ell}_z\psi_m(\varphi) = -i\,\frac{d}{d\varphi}\,\psi_m(\varphi) = m\psi_m(\varphi) \quad \rightsquigarrow \quad \psi_m(\varphi) \propto e^{im\varphi}. \tag{4.70}$$

Аналогично плоской волне в случае сдвига в процессе вращения у этой функции изменяется только фаза (см. (4.61)):

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\alpha)e^{im\varphi} = \psi_m(\varphi - \alpha) = e^{im(\varphi-\alpha)}. \tag{4.71}$$

Но в компактной геометрии *однозначная* функция координат должна принять то же самое значение после полного поворота на угол $\alpha = 2\pi$. Это приводит к условию $\exp(2\pi i m) = 1$. Поэтому собственные значения $\hat{\ell}_z$ являются *целыми числами*, $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$. Это не что иное, как *пространственное квантование* из уравнения (1.49). Мы опять подтвердили, что так называемые квантовые постулаты вытекают из требований симметрии, а если точнее, то для данного случая — топологии. Отметим также, что, как и в случае полноты набора плоских волн, угловые функции $\exp(im\varphi)$ с целыми значениями m образуют полный набор в пространстве однозначных угловых функций; соответствующее разложение — это просто ряд Фурье. Для того чтобы получить ортонормированный набор, нужно умножить экспоненту на нормировочный множитель $1/\sqrt{2\pi}$:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi}, \tag{4.72}$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi\, \psi^*_{m'}(\varphi)\psi_m(\varphi) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i(m-m')\varphi} = \delta_{m'm}. \tag{4.73}$$

Будучи собственной функцией всех операторов поворота в плоскости, каждая функция $\psi_m(\varphi)$ реализует одномерное представление этой абелевой группы.

4.8 Преобразование операторов

Преобразование координатного оператора (4.59) является частным случаем более общего правила. Если мы хотим преобразовать и волновую функцию ψ, и оператор $\hat{A}$, то мы применяем преобразование $\hat{T}$ к результату действия $\hat{A}\psi$. Предполагая существование *обратного преобразования*, получаем

$$\hat{T}\Big(\hat{A}\psi\Big) = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}\hat{T}\psi \equiv \hat{A}'\psi'. \tag{4.74}$$

Это означает, что преобразование только самого оператора определяется как

$$\hat{A} \Rightarrow \hat{A}' = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}. \tag{4.75}$$

В случае сдвига мы получаем:

$$\hat{A} \Rightarrow \hat{A}(a) \equiv \hat{\mathcal{D}}(a)\hat{A}\hat{\mathcal{D}}(-a) = e^{-(i/\hbar)a\hat{p}}\hat{A}e^{(i/\hbar)a\hat{p}}. \tag{4.76}$$

Чтобы найти результат подобного преобразования, можно использовать наличие непрерывного параметра. Взяв производную от $\hat{A}(a)$ по параметру a и сохраняя порядок операторов, получаем

$$\frac{d\hat{A}(a)}{da} = -\frac{i}{\hbar}\, e^{-(i/\hbar)a\hat{p}}\, [\hat{p}, \hat{A}]\, e^{(i/\hbar)a\hat{p}}. \tag{4.77}$$

Результат преобразования определяется коммутатором исследуемого оператора с генератором преобразования, в данном случае с оператором импульса. Для простых операторов координаты и импульса выражения (4.24) и (4.77) дают

$$\frac{d\hat{x}(a)}{da} = -1, \quad \frac{d\hat{p}(a)}{da} = 0. \tag{4.78}$$

Эти дифференциальные уравнения решаются с начальными условиями

$$\hat{x}(a=0) = \hat{x}, \quad \hat{p}(a=0) = \hat{p}. \tag{4.79}$$

Решение представляет собой естественный результат преобразования в результате сдвига:

$$\hat{x}(a) = \hat{x} - a, \quad \hat{p}(a) = \hat{p}, \tag{4.80}$$

координатный оператор сдвигается как в (4.59), импульсный оператор остаётся неизменным.

Задача 4.7

Найдите преобразование произвольной функции $\hat{F}(x)$ при сдвиге $\hat{\mathcal{D}}(a)$.

Решение.

Оператор преобразования (4.76):

$$\hat{F}(x; a) = e^{-(i/\hbar)a\hat{p}}\hat{F}(x)e^{(i/\hbar)a\hat{p}}. \tag{4.81}$$

Используя результат (4.33), из (4.77) получаем:

$$\frac{\partial \hat{F}(x;a)}{\partial a} = -\frac{\partial \hat{F}(x;a)}{\partial x}. \tag{4.82}$$

Общее решение этого дифференциального уравнения в частных производных даётся произвольной функцией f со смещённым аргументом:

$$\hat{F}(x;a) = \hat{f}(x-a). \tag{4.83}$$

Из начальных условий $\hat{F}(x;0) = \hat{F}(x)$ получаем, что преобразованный оператор есть смещённый начальный оператор

$$\hat{F}(x;a) = \hat{F}(x-a) \tag{4.84}$$

в согласии с преобразованиями (4.49) и (4.59). Смещённый оператор играет ту же самую роль по отношению к смещённой функции, что и начальный оператор по отношению к прежней функции.

Задача 4.8

Вычислите

$$\hat{X}(\alpha) = e^{-i\alpha\hat{\ell}_z}\hat{x}e^{i\alpha\hat{\ell}_z}, \quad \hat{Y}(\alpha) = e^{-i\alpha\hat{\ell}_z}\hat{y}e^{i\alpha\hat{\ell}_z} \tag{4.85}$$

и найдите геометрический смысл преобразования.

Решение.

С коммутатором (4.35) указанный выше метод приводит к системе уравнений:

$$\frac{d\hat{X}}{d\alpha} = \hat{Y}, \quad \frac{d\hat{Y}}{d\alpha} = -\hat{X} \tag{4.86}$$

с начальными условиями

$$\hat{X}(0) = \hat{x}, \quad \hat{Y}(0) = \hat{y}. \tag{4.87}$$

Решение представляет собой преобразование *вращения*:

$$\hat{X} = \hat{x}\cos\alpha + \hat{y}\sin\alpha, \quad \hat{Y} = \hat{y}\cos\alpha - \hat{x}\sin\alpha, \tag{4.88}$$

и координатное представление (4.64) находится в согласии с правилом (4.66):

$$X = \rho\cos(\varphi - \alpha), \quad Y = \rho\sin(\varphi - \alpha). \tag{4.89}$$

Задача 4.9

Вычислите

$$\hat{Z}(\theta) = e^{-i\hat{\ell}_y\theta}\hat{\ell}_z e^{i\hat{\ell}_y\theta} \tag{4.90}$$

и объясните геометрический смысл результата.

Решение.

Если дважды использовать коммутатор (4.37) и процедуру, изложенную в задаче 4.8, и решить простое дифференциальное уравнение, то можно получить

$$\hat{Z}(\theta) = \hat{\ell}_z\cos\theta + \hat{\ell}_x\sin\theta. \tag{4.91}$$

Сходство с предыдущей задачей позволяет выявить простой геометрический смысл этого преобразования — вращение вокруг оси z. Момент импульса преобразуется здесь как обычный *вектор*.

Задача 4.10

а) Докажите, что для операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, которые коммутируют с их коммутатором $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{C}$, так что $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$, справедливо следующее тождество:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{C}/2}. \tag{4.92}$$

б) Докажите более общий результат

$$e^{\hat{A}} \hat{F} e^{-\hat{A}} = \hat{F} + [\hat{A}, \hat{F}] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{F}]\right] + \frac{1}{3!}\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{F}]\right]\right] + \cdots . \tag{4.93}$$

Решение.

а) Рассмотрите оператор, содержащий вспомогательный параметр λ:

$$\hat{F}(\lambda) = e^{-\lambda\hat{A}} e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} e^{-\lambda\hat{B}}, \tag{4.94}$$

вычислите $d\hat{F}/d\lambda$ и покажите, что решение имеет следующий вид:

$$\hat{F} = e^{-(\lambda^2/2)\hat{C}}. \tag{4.95}$$

б) Сделайте подстановку $\hat{A} \Rightarrow \alpha\hat{A}$ и разложите в степенной ряд по α.

Дополнительная литература: [6–8].

Это, по сути своей, совершенно новая
ситуация, не имеющая аналогов ни
в одном из классических направлений
философской мысли

Джулиан Швингер, «Квантовая механика»

Глава 5

Соотношения неопределённостей

5.1 Соотношение неопределённости в волновой механике

Мы видели в предыдущей лекции, что в состоянии свободного движения с определённым значением импульса плотность вероятности нахождения частицы в точке $(\mathbf{r}, t)$ не зависит от координат и времени. Детектор, который регистрирует координаты и таким образом локализует частицу, может сработать равновероятно в любой момент, как если бы частицы были размазаны по всему пространству. С волновой точки зрения мы имеем бесконечную в пространстве и времени стационарную волну. Как иногда говорят (хотя это не лучшее выражение), детектор вызывает «коллапс» волны в точку. Измерение — это оператор, который фиксирует положение частицы, преобразуя плоскую волну в локализованное состояние. В конце курса мы вернёмся к физике процесса измерения.

Как мы подчеркивали ранее, плоская волна, которая не может быть нормирована, является идеализацией реального эксперимента, где пучок частиц, созданный источником и сформированный внешними полями, направлен в экспериментальную зону, а частицы регистрируются в детекторе как отдельные события. Реальный пучок всегда имеет *конечную длительность* в пространстве и времени. Рассмотрим волновой фрагмент как импульс определённой периодичности, но конечной длины (*волновой цуг*, или *волновой пакет*). С помощью специального затвора, который отрезает у волны хвосты, мы создали сигнал вида:

$$\Psi(t) = \begin{cases} e^{-i\omega_0 t}, & |t| < \tau/2, \\ 0, & |t| > \tau/2. \end{cases} \tag{5.1}$$

Здесь мы записали комплексное выражение, но далее используем его вещественную часть, изображённую на рис. 5.1. Момент прохождения волны

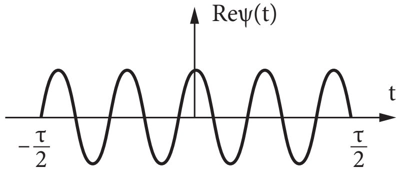

Рис. 5.1: Волновой цуг выражения

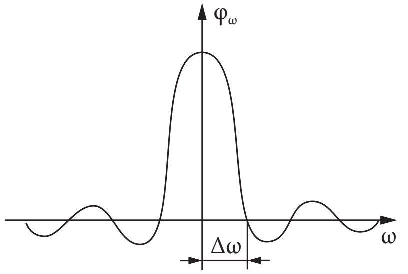

Рис. 5.2: Спектральный анализ сигнала, показанного на рис. 5.1

определён с точностью $\Delta t \sim \tau$. Из-за конечной длительности волновой цуг не эквивалентен монохроматической волне определённой частоты ω_0. Гармонический анализ даёт *спектр* сигнала, показанный на рис. 5.2,

$$\Phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \Psi(t) e^{i\omega t} = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt\, e^{i(\omega-\omega_0)t} = \frac{2\sin\Big((\omega-\omega_0)\tau/2\Big)}{\omega-\omega_0}. \quad (5.2)$$

Этот спектр имеет высокий максимум при $\omega = \omega_0$ и слабые вторичные максимумы с амплитудами, уменьшающимися обратно пропорционально расстоянию от центра шкалы частот. Высота главного максимума равна τ, в то время как *ширина* спектрального интервала $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, содержащего наибольшие амплитуды Фурье-гармоник, может быть оценена как расстояние до первого нуля, $\Delta\omega \sim 2\pi/\tau$. С увеличением продолжительности τ спектр всё больше концентрируется вблизи центра, при этом площадь под спектральной кривой сохраняется:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \Phi(\omega) = 2\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \frac{\sin(\xi)}{\xi} = 2\pi \quad (5.3)$$

(последний интеграл, полученный с помощью замены переменных $\xi = (\omega - \omega_0)\tau$, равен π, как это легко получить интегрированием с помощью вычетов). В пределе $\tau \to \infty$ мы приходим к бесконечно узкому и беско-

нечно высокому спектру с фиксированной нормировкой. Это полностью соответствует определению дельта-функции, так что мы получили ранее обещанное представление (3.25), которое эквивалентно также (4.9):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\omega-\omega_0)t} = 2\pi\delta(\omega-\omega_0). \tag{5.4}$$

Только в пределе бесконечного τ мы получим монохроматическую волну определённой частоты.

Эти соображения дают типичный пример *дополнительности*, возникающей при рассмотрении классических величин, которые в квантовой механике не могут иметь определённые значения одновременно. Гармонический анализ позволяет выявить такие дополнительные величины, например: длительность и частота, пространственный размер и импульс. Из нашего примера мы видим, что их неопределённости связаны выражением

$$\Delta t \cdot \Delta\omega \sim 1, \tag{5.5}$$

где мы указываем только порядок величины оценки, потому что мы пока не точно сформулировали, что такое неопределённости Δt и $\Delta\omega$. В полной аналогии с этим примером из *координатного* Фурье-анализа мы могли бы получить неопределённость произведения пространственной ширины сигнала и разбросом его волнового вектора:

$$\Delta x \cdot \Delta k \sim 1. \tag{5.6}$$

В конечном итоге, переводя эти соотношения на язык частиц, мы можем записать *соотношения неопределённостей* между энергией и временем пролёта:

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar \tag{5.7}$$

или координатой и импульсом:

$$\Delta p \cdot \Delta x \sim \hbar. \tag{5.8}$$

Они непосредственно вытекают из корпускулярно-волнового дуализма, выраженного преобразованием Фурье, и должны быть интерпретированы как невозможность создания состояния с точно фиксированными значениями координаты и сопряжённого импульса. Такие состояния не существуют в природе, и этот факт не зависит от точности наших измерительных

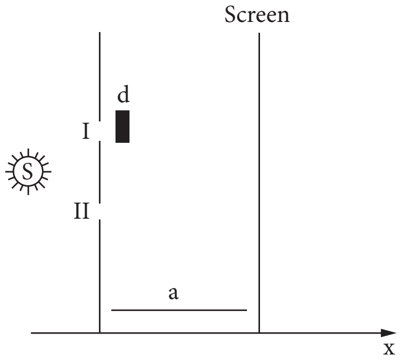

Рис. 5.3: Попытка выделить щель в эксперименте с двумя щелями

инструментов. Отметим ещё раз, что постоянная Планка всего лишь *масштабный фактор*, в то время как соотношение неопределённостей является типичным волновым явлением, которое имеет свои аналоги в оптике, акустике и других областях, связанных с *физикой волн*, но не в классической механике частиц. Как мы увидим позже, существует *нижний предел* произведения неопределённостей (5.8).

5.2 Простые примеры

Типичные примеры можно найти во всех учебниках (см., например, лекции [9]). Исторически обсуждения этой темы известными физиками сыграли важную роль в принятии и понимании квантовой механики. Ниже будет показано, что соотношения неопределённостей делают невозможным наблюдение квантовой интерференции различных путей эволюции *одновременно* с фиксацией конкретной траектории.

Рассмотрим схему эксперимента с двумя щелями (рис. 1.1). Добавим к классической схеме детектор (рис. 5.3), например, легкое зеркало, которое позволит определить по его слабой отдаче, какая щель была использована частицей в отдельном событии. Тогда в соответствии с принципом неопределённости интерференционная картина будет полностью искажена. Аргумент состоит в следующем. Размер детектора d в направлении распространения x должен быть малым, иначе он будет также регистрировать частицы, проходящие через другую щель. Например, установим его размер $\Delta x_d < a/2$, где a — расстояние до экрана. *Но детектор, как квантовая система, также подвержен принципу неопределённости.* Ограничение на его положение ведёт к ограничению на его импульс: $\Delta p_d \sim \hbar/\Delta x_d \sim 2\hbar/a$. Что-

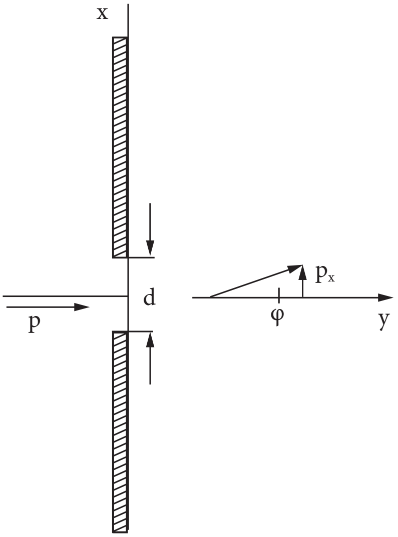

Рис. 5.4: Схема дифракции

бы выполнить задачу регистрации частицы, измеренный импульс отдачи p_r детектора должен превышать его неопределённость, $p_r > \Delta p_d$. Импульс отдачи возникает при взаимодействии детектора с частицей при её регистрации. Поэтому импульс частицы должен измениться по крайней мере на $\Delta p \sim p_r > 2\hbar/a$. После этого частица движется к экрану. На этом пути (большем чем $a/2$) фаза kx соответствующей волны де Бройля приобретает неопределённость больше, чем $\Delta k \cdot (a/2) = (\Delta p/\hbar) \cdot (a/2) \sim 1$ радиан. Это полностью разрушает интерференционную картину.

Задача 5.1

Обсудите с точки зрения соотношения неопределённостей *дифракцию* волны на отверстии в непрозрачном экране (рис. 5.4).

Решение.

При размере отверстия d мы имеем $\Delta x \sim d$, в то время как угол дифракции $\varphi \sim \lambda/d$, где $\lambda \ll d$ — длина волны. Тогда неопределённость волнового вектора (компонента $k_\perp$, перпендикулярная к падающему пучку) составляет $\Delta k_\perp \sim k\varphi \sim 1/d$, или $\Delta k_\perp \Delta x \sim 1$.

Однако такое доказательство не является полностью убедительным. Было бы естественно ожидать, что неопределённость компоненты $k_\perp$ из-за дифракции ограничена сверху длиной исходного волнового вектора, $\Delta k_\perp = k \sin\varphi$ (рис. 5.4), и, следовательно, $\Delta k_\perp \leqslant k$. Поскольку $\Delta x \leqslant d$, неравенство выглядит как $\Delta k_\perp \leqslant k$. В отличие от уравнения (5.8) его можно сделать сколь угодно малым за счёт уменьшения ширины щели d. Чтобы

понять, что происходит, мы должны разобраться немного глубже. Если *перед* щелью, $y < 0$, где ось y перпендикулярна плоскости экрана, у нас есть плоская волна e^{iky}, то *после* щели, $y > 0$, в плоскости xy имеем также x-компоненту импульса, $k_x \equiv \xi \neq 0$. Так как в стационарной ситуации полная энергия E сохраняется, то компонента $k_y \equiv \eta$ меняется и может быть найдена из равенства $\xi^2 + \eta^2 = 2mE/\hbar^2 = k^2$. Соответствующая волновая функция после щели зависит от двух переменных:

$$\psi(x,y) = Ce^{i\xi x + i\eta y} = Ce^{i\left(\xi x + \sqrt{k^2-\xi^2}y\right)}. \tag{5.9}$$

Здесь мы не можем утверждать, что $|\eta| < k$. Если бы это было так, то волна бы просто распространялась под углом φ к оси y, с $\tan\varphi = \xi/\eta$. Но это не дало бы *полный набор* возможных решений. Мы должны принимать во внимание также вариант, где $|\xi| > k$, тогда $\sqrt{k^2-\xi^2} = \pm i\sqrt{\xi^2-k^2}$. Физически решение не может расти бесконечно, но выбирая знак $+$, мы приходим к функции, экспоненциально падающей с увеличением расстояния y от щели (*затухающая волна*). Общее решение позади экрана даётся *суперпозицией*:

$$\psi(x,y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi}\, C(\xi) e^{i\left(\xi x + \sqrt{k^2-\xi^2}y\right)}. \tag{5.10}$$

Мы не можем сделать компоненту волнового вектора вдоль оси x мнимой, поскольку тогда мы снова получим волну, растущую в одном из направлений вдоль экрана.

Амплитуды $C(\xi)$ определяются граничными условиями на щели $y = 0$. Предположим, что падающая волна коллимируется на экране и имеет там единичную амплитуду:

$$1 = \int \frac{d\xi}{2\pi}\, C(\xi) e^{i\xi x}, \quad -\frac{d}{2} \leqslant x \leqslant \frac{d}{2}. \tag{5.11}$$

Обратное Фурье-преобразование даёт

$$C(\xi) = \int_{-d/2}^{d/2} dx\, e^{-i\xi x} = \frac{2\sin(\xi d/2)}{\xi}. \tag{5.12}$$

Решение позади щелей имеет вид

$$\psi(x,y)=\int_{|\xi|<k}\frac{d\xi}{\pi}\,\frac{\sin(\xi d/2)}{\xi}\,e^{i[\xi x+\sqrt{k^2-\xi^2}y]}+\int_{|\xi|>k}\frac{d\xi}{\pi}\,e^{i\xi x-\sqrt{\xi^2-k^2}y}. \quad (5.13)$$

Первый интеграл содержит волны, распространяющиеся под углом φ к оси y, и в самом деле приводит к неравенству $\Delta k_x \Delta x \leqslant kd$, так как распределение вероятности $|C(\xi)|^2$ отбирает $\xi d \sim 1$. Однако для малых d (по сравнению с длиной волны, $kd \ll 1$) второй интеграл по-прежнему важен в случае $\xi \sim 1/d \gg k$. Это означает, что затухающие волны с $|\xi| > k$ являются существенными, а аргумент, что $\Delta k_x < k$, является неправильным. Для $\Delta k_x \sim 1/d$ мы возвращаемся к стандартному соотношению неопределённостей (5.8). Математически строгое решение для узкой щели, $kd \ll 1$, даёт, как было уже давно известно *Рэлею*, по существу тот же самый результат с заменой $\sin(kd/2)$ в амплитудах (5.12) на функции Бесселя $J_1(kd/2)$ с аналогичными свойствами.

Попробуем быть более изобретательными, вернувшись к эксперименту с двумя щелями. Рассмотрим частицу с электрическим зарядом e. Пусть угол дифракции (задача 5.1), определяемый отношением $\varphi \sim \lambda/d$ длины волны к размеру щели, мал. Установим за щелями (рис. 5.5) две узкие (но покрывающие угол φ) металлические трубки T_1 и T_2 достаточной длины, чтобы вместить весь дифрагирующий волновой пакет. Трубки, однако, должны быть короче, чем расстояние, на котором идущие через щели лучи пересекаются геометрически. В таких условиях существует временной интервал Δt, когда волновой пакет, если он проходит через определённую трубку, содержится полностью внутри неё. Теперь приложим напряжение V к трубке T_1 в течение промежутка времени $\tau < \Delta t$. Переходными процессами можно пренебречь, если напряжение включается и выключается сравнительно медленно. Частицы, движущиеся внутри металлических трубок, перемещаются только *в области с нулевым электрическим полем.* Единственным эффектом временно приложенного напряжения является увеличение энергии eV (или увеличение частоты $eV/\hbar$) для всех монохроматических компонент волнового пакета в трубке T_1. За время τ волна в T_1 приобретёт дополнительную фазу $eV\tau/\hbar$. Если фазовый сдвиг не кратен 2π, интерференционная картина на экране получит видимое смещение, которое может управляться изменением $V\tau$.

Первый вывод, который можно сделать: ситуация несколько отличается от классического электромагнетизма. Не только *поле*, но и *потенциал* изменяет результат эксперимента. Это означает, что в квантовой меха-

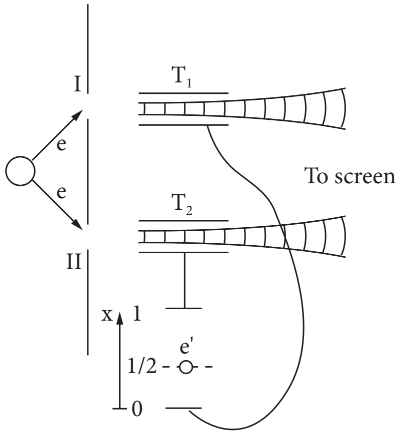

Рис. 5.5: Модифицированный эксперимент с двумя щелями

нике электромагнитные потенциалы играют роль отличную от таковой в классической физике, они становятся *наблюдаемыми*, если различные части волновой функции приобретают различные *фазы*. Аналогичные рассуждения верны также и для *векторного потенциала*. Наблюдаемость потенциалов через разность фаз компонент волновой функции на самом деле *необходима* для согласия с соотношением неопределённостей. С другой стороны, эти особенности квантового мира имеют большое практическое значение для многих приложений, в том числе в макроскопической физике (глава 13).

Теперь мы можем попытаться использовать схему, показанную на рис. 5.5, чтобы преодолеть соотношение неопределённости. К одной из металлических труб приложено дополнительное напряжение. Зафиксируем пробный заряд e' точно в середине конденсатора, $x = l/2$, с тем, чтобы не создавать разность потенциалов между трубками T_1 и T_2. Мы позволим заряду e' двигаться в течение интервала τ в тот момент, когда заряд e находится внутри трубок. Идея заключается в использовании направления ускорения заряда в качестве индикатора трубки, в которой распространяется волна. Эта идея не работает только из-за соотношения неопределённостей — устройство уничтожает интерференцию.

Задача 5.2

Показать, что этот эксперимент разрушает интерференционную картину.

Решение.

Напряжение на обкладках конденсатора при прохождении волнового пакета с зарядом e равно $V = e/C$, где C — полная ёмкость конденсатора и трубок, а знак V должен решить проблему выбора между трубками. Электрическое поле $\mathcal{E} \sim V/l \sim e/lC$, появляющееся внутри конденсатора, сообщает пробному заряду импульс $p \sim e'\mathcal{E}\tau \sim ee'\tau/lC$. Для того чтобы измерить этот импульс, его неопределённость должна быть мала, $\Delta p < p$. Это увеличивает неопределённость положения заряда — $\Delta x \simeq \hbar/\Delta p \sim \hbar lC/ee'\tau$. С другой стороны, смещение Δx заряда от среднего положения создаёт дополнительное напряжение

$$\Delta V \sim \frac{e'}{C}\,\frac{\Delta x}{l} \sim \frac{e'}{Cl}\,\frac{\hbar lC}{ee'\tau} = \frac{\hbar}{e\tau}. \tag{5.14}$$

Это приводит к дополнительному сдвигу фазы между трубками:

$$\Delta\varphi \sim \Delta V\,\frac{e\tau}{\hbar} \sim 1\,\text{радиан}, \tag{5.15}$$

которое размывает интерференционную картину.

5.3 Дополнительность и вероятность

Корпускулярно-волновой дуализм и соотношения неопределённостей заставляют формулировать задачу в квантовой механике иначе, чем в механике классической. Назовём *состоянием* системы любую её невозмущённую временную эволюцию после начального приготовления (инициализации). В классическом случае движение определяется набором координат и скоростей (или импульсов), даже если число степеней свободы бесконечно велико (классическое *поле*). Динамические переменные в классическом *фазовом пространстве* координат и импульсов также могут быть представлены с помощью функций распределения вероятности. В этом случае мы будем иметь дело с *классическим ансамблем* систем, где каждый участник ансамбля воплощает одну реализацию возможного набора переменных. В принципе, в любой копии классического ансамбля возможен *непрерывный* мониторинг изменений переменных — это основополагающий принцип, лежащий в основе классической теории. Мы можем надеяться на улучшение экспериментальной установки таким образом, что её влияние на систему в процессе измерения станет меньше, чем любой *заданный наперёд* предел. В этом случае мы можем определить переменные системы в любой момент

с любой желаемой точностью с незначительными искажениями, вносимыми измерением.

Атомная структура материи и квантование излучения вносят серьёзные изменения в описание динамики процессов. Некоторые величины являются *дискретными* по своей природе и не могут быть бесконечно делимыми. Измерительная аппаратура, присутствие которой необходимо, поскольку атом может быть изучён только во взаимодействии с ним, также состоит из атомов (даже если их число астрономически велико), и её воздействие на исследуемый объект не может быть меньше некоторого предела, который может зависеть от характера эксперимента. Нижний предел возмущения является неизбежной особенностью атомного или квантового мира и не может быть преодолён искусством экспериментатора.

Теперь ясно, что некоторые виды экспериментов могут быть взаимно *несовместимыми.* Если мы говорим, что переменная A имеет в момент времени t подтверждённое экспериментом *определённое* значение a, то это означает, что измерение этой величины превратило начальное невозмущённое состояние в состояние с определённым значением A. Такое действие, которое должно быть сильнее, чем вышеупомянутый нижний предел, может лишить нас возможности однозначно предсказать результат измерения на близкий момент времени другой физической величины B. Мы можем сказать иначе: в (том, что осталось после первого измерения) состоянии с определённым значением переменной a переменная B может не иметь определённого значения. Состояния с *одновременно* определёнными величинами A и B, возможно, не существует, иными словами, для некоторых пар A и B такие состояния не могут быть физически реализованы.

Наше соотношение неопределённостей (5.8) демонстрирует именно это, показывая конкретный пример пары переменных, которые не могут иметь определённые значения в любом физическом состоянии. Эта несовместимость означает, что природа не даёт ответа на вопрос, сформулированный на повседневном языке, который оказывается недостаточным и не применимым к физической реальности на микроскопическом уровне. Если операторы соответствуют измерению физических величин, то соотношение неопределённости указывает, что результат зависит от порядка измерений. Только имея дело с *макроскопическими* телами и процессами, где действие несравненно больше, чем квант действия $\hbar$, можно пренебречь различиями на уровне $\hbar$ и вернуться к классической «реальности». Далее в главе 14 мы увидим, что даже на макроскопических масштабах можно наблюдать квантовые эффекты, приводящие к *макроскопической когерентности.*

Держа в уме существование квантовой неопределённости, необходимо изменить формулировку динамической задачи. Состояние может быть определено набором *одновременно совместимых* величин A, скажем, в момент времени t_0. Измеряя в момент времени $t > t_0$ величину B, мы не можем гарантировать, что результат будет уникальным. В серии экспериментов при одинаковых условиях в общем случае мы получаем *распределение* результатов. Каждое измерение даёт величину B, которая принадлежит к *спектру* возможных значений этой величины, причём спектр может быть как дискретным, так и непрерывным. В долгой серии одинаковых измерений будут проявляться *статистические закономерности*, и мы сможем оценить *вероятность* того или иного результата. После того, как в индивидуальном акте измерения получена величина b переменной B, мы можем потерять возможность иметь определённое значение первоначально фиксированных переменных A, даже если они не изменялись в течение предыдущей невозмущённой эволюции.

Измерения величин, связанных взаимными неопределённостями, являются *дополнительными* или *комплементарными*. Интерференционная картина на экране в эксперименте с двумя щелями свидетельствует о волновой природе света и материи. Однако взаимодействие дифрагирующего пучка с атомами детектора происходит квантовым образом, т. е. атомы поглощают и испускают свет дискретными порциями — фотонами. Интерференционные полосы появляются после многих актов взаимодействия фотонов с атомами экрана. Для достаточно интенсивных пучков быстро возникает стационарное распределение максимумов и минимумов. У слабых пучков отдельные взаимодействия фотонов дают такую картину постепенно путём случайного появления в разных точках. Это означает, что волновые свойства являются присущими отдельным частицам, в то время как они наблюдаются статистически в различных точках во многих актах взаимодействия, которые создают состояния, локализованные на экране. Продвигаясь ещё дальше, можно предложить интерпретацию квантовой теории, вообще избегая понятия частиц [10]. Здесь мир управляется *волнами симметрии*, а взаимодействие с детектором изменяет симметрию, в то время как отдельные щелчки детектора случайны. Я скептически отношусь к этой идее, потому что природа *макроскопического* детектора не ясна.

Как мы уже видели на простых примерах, в двухщелевой схеме попытка поймать фотон на его проходе через определённую щель неизбежно локализует его траекторию и, следовательно, вызывает неопределённость импульса, нарушая фазовые соотношения и разрушая интерференцию. В этом случае серия измерений будет производить только простое нало-

жение *интенсивностей* соответствующих отдельным щелям. Возможной формализацией этой ситуации является введение суперпозиции двух *амплитуд* (двух компонент волновой функции) $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$. При невозмущённом распространении через щели эта полная амплитуда достигает экрана и образует интерференционную картину с интенсивностью, пропорциональной

$$|\Psi|^2 = |\Psi_1|^2 + |\ Psi_2|^2 + 2\text{R}e\,(\Psi_1^*\Psi_2). \tag{5.16}$$

При распространении с промежуточной фиксацией траектории неопределённость результирующего импульса влечёт *разрушение когерентности*, интерференционный член исчезает, в результате чего

$$|\Psi|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2. \tag{5.17}$$

Эти два типа экспериментов, один из которых связан с интерференционной картиной на экране без фиксации траектории даже в виде выбора между двумя щелями, а другой — с измерением промежуточных координат пучка и, соответственно, уничтожением интерференции, дополняют друг друга. Различные эксперименты выделяют различные аспекты описания — волновые или корпускулярные. *Корпускулярно-волновой дуализм* — это не утверждение, что один и тот же объект ведёт себя в одном эксперименте одновременно и как волна, и как частица. Напротив, из-за дуализма такие эксперименты невозможны.

Связь между двумя (или более) типами экспериментов устанавливается путём статистической интерпретации. Конкретный фотон может быть зарегистрирован в любом месте экрана. Большое число фотонов попадает в яркие места, где волновая интерпретация предсказывает большую интенсивность (5.16). Мы отождествляем интенсивность, или квадрат модуля волновой функции, с *вероятностью* квантового процесса. Максимально возможная квантовая информация о системе — это знание вероятностей всех возможных экспериментов. Волновая функция кодирует все эти вероятности. Например, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ непосредственно определяет вероятности координатных измерений, в то время как *та же функция* $\Phi(\mathbf{p}, t)$, записанная в импульсном представлении, является амплитудой вероятности импульсных измерений. Квантовая динамика должна предсказать все соответствующие вероятности через динамические уравнения, которым подчиняется волновая функция системы.

5.4 Волновой пакет: распространение

Во многих ситуациях мы хотели бы объединить корпускулярные и волновые свойства, пытаясь создать объект, насколько возможно близкий к классической частице с более или менее определённой траекторией и импульсом. Не нарушая соотношения неопределённостей, мы можем позволить некоторые неопределённости координаты и импульса, допустимые с практической точки зрения в соответствии с классическим представлением о частице. Пространственный размер волновой функции может быть малым по сравнению с характерным размером экспериментальной установки, например, размером вакуумной камеры или неоднородностью поля в ускорителе. В то же время неопределённость импульса может быть значительно меньше, чем средний импульс. Полное решение задачи нахождения «лучшего» сочетания такого рода будет дано позже, исходя из общей теории, но уже сейчас мы можем рассмотреть распространение *узких волновых пакетов*.

Построим волновой пакет путём наложения компонент импульса k с амплитудами $A(k)$, которые имеют значительную величину и тот же знак в небольшом интервале Δk вокруг *среднего значения* k_0. В области Δk энергия кванта $E(k) = \hbar\omega(k)$ может быть приближённо представлена в виде разложения

$$\omega(k) \approx \omega_0 + (k - k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 + \dots, \tag{5.18}$$

где $\omega_0 = \omega(k_0)$. С амплитудами, сосредоточенными в этом интервале, волновая функция может быть записана как

$$\Psi(x,t) = \int_{\Delta k} dk\, A(k) e^{ikx - i\omega(k)t}. \tag{5.19}$$

В приближении узкого пакета (5.18) находим

$$\Psi(x,t) \approx e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int dk\, A(k) \exp\left\{ i(k-k_0)\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]\right\}. \tag{5.20}$$

Волновая функция — это «несущая» плоская волна для центра пакета (k_0, ω_0) с «амплитудой» модуляции, задаваемой интегралом в формуле (5.20), которая по-прежнему зависит от координат и времени, но, предположительно, содержит только медленно меняющиеся компоненты с малыми волновыми векторами $k - k_0$ и частотами $\omega - \omega_0$ (рис. 5.6). Более того, эта

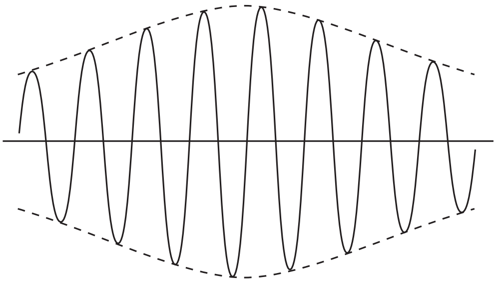

Рис. 5.6: Движущийся волновой пакет

переменная амплитуда на самом деле зависит не от времени и координат по отдельности, а только от их комбинации $x - (d\omega/dk)_0 t$. Для всех точек x и моментов времени t, связанных условием

$$x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t = const, \tag{5.21}$$

модуляция амплитуды имеет одно и то же значение. Это означает, что в приближении (5.18) пакет движется как единое целое с *групповой скоростью*

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0, \tag{5.22}$$

которая совпадает с классической скоростью частицы $v = dE/dp$ (сравните, например, с (3.91)). Групповую скорость следует отличать от *фазовой скорости* $v_{\rm ph} = \omega(k)/k$. Заметим также, что конечная ширина в импульсном пространстве приводит к энергетическому разбросу $\Delta E \approx v_g \Delta p$, в то время как за счёт конечного размера пакета в пространстве Δx время пролёта также конечно $\Delta t \sim \Delta x/v_g$. Поэтому соотношение неопределённостей энергия-время $\Delta E \cdot \Delta t \sim \Delta x \cdot \Delta p$ (выражение (5.7)) тоже выполняется.

Задача 5.3

Волновой пакет распространяется в среде с законом дисперсии $v_{\rm ph} = a + b\lambda$, где a и b — константы и λ — длина волны. Покажите, что произвольная первоначальная форма волнового пакета периодически восстанавливается, и найдите этот период.

Решение.

Здесь $\omega(k) = k(a + b\lambda) = ak + 2\pi b$. По истечении времени T волновой пакет

$$\Psi(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx - i\omega(k)t} = e^{-2\pi i b t} \int \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx - iakt} \tag{5.23}$$

описывается уравнением

$$\Psi(x, t+T) = e^{-2\pi i b(t+T)} \int \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ik[x - a(t+T)]}. \tag{5.24}$$

Сдвиг фазы под интегралом означает перемещение всего пакета на расстояние aT, в то время как полная фаза восстанавливается при $bT = n$ (целое число), т. е. период равен $1/b$. Фазовая скорость равна $(\lambda/T) + a$, и мы наблюдаем волну из системы координат, где среда движется со скоростью a, которая добавляется к «естественной» скорости λb. Для *линейного* закона дисперсии расплывания нет (раздел 5.5), и фазовая картина полностью восстанавливается после смещения на длину волны.

Если амплитуда $A(k)$ приблизительно постоянна в диапазоне Δk, то мы можем вывести её из интеграла (5.20), выполнив интегрирование точно так же, как в уравнении (5.2). Максимум волнового пакета может быть найден из требования нулевой производной $d\varphi/dk$ фазы экспоненты в подынтегральном выражении (5.20):

$$\varphi(k) = (k - k_0) \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t \right]. \tag{5.25}$$

Условие *стационарной фазы* означает, что фаза не изменяется между смежными компонентами k волнового пакета, их интерференция *конструктивна*, и в результате амплитуда максимальна.

Не нарушая соотношения неопределённостей, мы пришли к тому, что цуг волн с огибающей, имеющей конечный размер $\Delta x \sim 1/\Delta k$ свободно движется с классической скоростью. Расширив это описание на *квазиклассический* случай в присутствии внешних полей, медленно (по сравнению с Δx и $\Delta t \sim \Delta x / v_g$) изменяющихся в пространстве и времени, мы видим, что движение может считаться свободным в каждом интервале малой длины. Затем мы повторяем тот же приём в следующих интервалах, при этом средний импульс k_0 будет плавно меняться вдоль пути и волновой пакет будет двигаться близко к классической траектории.

5.5 Расплывание волнового пакета

Вышеприведённые соображения становятся точными, если закон дисперсии $\omega(k)$ *линеен*, как для распространения света в вакууме, когда $\omega = ck$. Если это не так, то в разложении (5.18) присутствуют высшие члены. Они привносят специфические квантовые эффекты, даже если ожидается, что движение является почти классическим. Причина состоит в том, что групповые скорости (5.22) в разных частях волнового пакета с *нелинейным* законом дисперсии различны. Подразделяя пакет на меньшие части, мы увидим, что они движутся слегка по-разному и эти эффекты накапливаются со временем, приводя к искажению пакета.

Из-за дисперсии разные гармоники волнового пакета пройдут разные расстояния за одно и то же время t. Двигаясь вдоль траектории, волновой пакет претерпевает *квантовое расплывание.* При неопределённости импульса Δp разброс скоростей для частицы с $p = mv$ есть $\Delta v \sim \Delta p/m$ и размер будет увеличиваться со временем как

$$(\Delta x)_{\rm spr} \sim \Delta v \cdot t \sim \frac{\Delta p}{m} t \sim \frac{\hbar t}{m \Delta x}. \tag{5.26}$$

Поскольку начальная неопределённость положения $(\Delta x)_0$ и дополнительное расплывание (5.26) некогерентны, мы можем ожидать, что они складываются *квадратично*, так что пространственный размер пакета растёт со временем приблизительно как

$$(\Delta x)_t^2 \approx (\Delta x)_0^2 + (\Delta x)_{\rm spr}^2. \tag{5.27}$$

В обычных условиях для атомных и ядерных пучков, а также для пучков элементарных частиц в ускорителях эффект квантового расплывания мал и отстаёт от нормального движения вдоль траектории.

Задача 5.4

Оцените расплывание протонного пучка радиуса 0.1 мм с энергией 1 ГэВ на пути 10 м от ускорителя до детектора.

Задача 5.5

Мячик для пинг-понга прыгает, упруго отражаясь от плоской платформы радиуса 5 см. Оцените максимальное число отскоков.

Задача 5.6

Выведите оценку расплывания (5.27) прямым вычислением, учитывая следующий член в разложении (5.18).

Задача 5.7

Покажите, что расплывание *релятивистского* волнового пакета в направлении, перпендикулярном скорости, больше продольного расплывания в $\gamma^2 = (E/mc^2)^2$ раз.

Как показано в разделе 3.4, временная эволюция может быть описана (3.38) в терминах функции Грина (3.37). Для свободного движения стационарные состояния это плоские волны, так что с нормировкой (4.9) мы получаем в одномерном случае

$$G(x,t;x',t') = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{(i/\hbar)[p(x-x')-E(p)(t-t')]}. \tag{5.28}$$

Для невозмущённой эволюции пропагатор (3.37) всегда является функцией разности $\tau = t - t'$. Это следует из определения стационарных состояний, которые используются в качестве базиса в уравнении (3.34). Вследствие однородной зависимости от времени смещение начала отсчёта времени несущественно для распространения. Существенно, однако, что *для свободного движения* пропагатор (5.28) зависит только от разности и *пространственных* координат $\xi = x - x'$, а не от x и x' по отдельности. Это согласуется со смыслом импульса как генератора трансляций (раздел 4.5): свободное движение инвариантно относительно сдвига начала отсчёта координат.

Задача 5.8

Выведите явное выражение для пропагатора в одномерном и трёхмерном случаях свободного движения.

Решение.

Для одномерного движения с $E(p) = p^2/2m$

$$G(x,t;x',t') \equiv G(\xi,\tau) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\, e^{(i/\hbar)m\xi^2/2\tau}, \quad \xi = x - x' \tag{5.29}$$

а в трёхмерном случае

$$G(\vec{\xi},\tau) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{3/2} e^{(i/\hbar)m\vec{\xi}^2/2\tau}, \quad \vec{\xi} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'. \tag{5.30}$$

В соответствии с уравнением (5.29) за время τ исходная δ функция (3.36) расплывается на расстояние ξ, $\xi^2 \sim \hbar\tau/m$; на больших расстояниях экспонента в пропагаторе начинает быстро осциллировать и даёт пренебрежимо

малый вклад в волновую функцию (3.38). Это согласуется с нашей простой оценкой (5.26).

Задача 5.9

Найдите функцию Грина *в импульсном представлении*, $G(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t')$, для свободного движения.

Решение.

Взяв импульсы p и p' в качестве независимых переменных в определении (3.37), мы используем полный набор «локализованных» импульсных функций $\Phi_{p_0}(p)$ (4.42) и получаем

$$\begin{aligned} G(p,t;p',t') &= \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar}\, 2\pi\hbar\, \delta(p-p_0) 2\pi\hbar\, \delta(p'-p_0) e^{(i/\hbar)E(p_0)(t-t')} = \\ &= 2\pi\hbar\, \delta(p-p') e^{(i/\hbar)E(p)\tau}. \end{aligned} \tag{5.31}$$

Это явно демонстрирует сохранение импульса при свободном движении с произвольным законом дисперсии $E(p)$. Трёхмерное обобщение тривиально.

Задача 5.10

Для свободно движущегося гауссовского волнового пакета, описываемого начальной волновой функцией

$$\Psi(x, t = 0) = Ae^{(i/\hbar)p_0 x - (x - x_0)^2/(4\sigma^2)}, \tag{5.32}$$

найдите волновую функцию $\Psi(x, t > 0)$ и средние значения $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$ как функции времени.

Решение.

Нормированное распределение вероятности в начальный момент, $A = (2\pi\sigma^2)^{-1/4}$, является гауссовым (3.20),

$$|\Psi(x, t = 0)|^2 = \mathcal{G}(x; x_0, \sigma). \tag{5.33}$$

Используя функцию Грина для свободного движения (5.30) и интегрируя согласно уравнению (3.38) (гауссовы интегралы вычисляются выделением полного квадрата в экспоненте), мы получаем

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1 + (i\hbar t)/(2m\sigma^2)}} e^{-F(x,t)}, \tag{5.34}$$

где

$$F(x, t) = \frac{2m\sigma^2\hbar^2(x - p_0 t/m)^2 + i\hbar^3 x^2 t + 4i\hbar\sigma^4 m p_0[2x - (p_0 t/m)]}{2m\hbar^2(4\sigma^4 + \hbar^2 t^2/m^2)}. \tag{5.35}$$

Гауссовый пакет сохраняет гауссову форму. Распределение вероятности в любое время t даётся выражением

$$|\Psi(x, t)|^2 = \mathcal{G}(x; x_0(t), \sigma(t)), \tag{5.36}$$

центр пакета равномерно движется с классической скоростью,

$$\langle x \rangle_t = x_0(t) = \frac{p_0}{m} t, \tag{5.37}$$

а среднеквадратичное отклонение,

$$\sigma^2(t) = [\Delta x(t)]^2 = \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2 = \sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2\sigma^2}, \tag{5.38}$$

возрастает в соответствии с оценкой (5.27). Начальная ширина и расплывание складываются *квадратично*. Импульсная функция распределения

также гауссова,

$$|\Phi(p,t)|^2 = \mathcal{G}(p;p_0,\sigma_p), \tag{5.39}$$

но её центр тяжести и ширина не меняются со временем, как и ожидалось вследствие сохранения импульса,

$$\langle p\rangle = p_0, \tag{5.40}$$

$$\sigma_p^2 = [\Delta p]^2 = \langle (p-p_0)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}. \tag{5.41}$$

Произведение неопределённостей растёт со временем,

$$(\Delta x)\cdot(\Delta p) = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^4}}. \tag{5.42}$$

Обратите внимание, что наименьшее его значение (при $t=0$) равно

$$\Big((\Delta x)\cdot(\Delta p)\Big)_{\min} = \frac{\hbar}{2}. \tag{5.43}$$

5.6 Оценки по соотношению неопределённостей

Принцип неопределённости несёт не только отрицательное содержание, устанавливая предел классической картины объекта, который имел бы одновременно определённое положение и определённую скорость. Мы можем использовать этот принцип, чтобы получить положительную информацию о многих квантовых явлениях.

Например, рассмотрим движение в притягивающем одномерном потенциале $U(x)$, имеющем минимум (классическое положение равновесия) в точке $x=0$. Если мы приблизительно знаем размер L области финитного движения вокруг минимума, то мы можем оценить неопределённость импульса как $\Delta p \sim \hbar/L$. Это соответствует минимальному значению в соотношении неопределённостей. В связанном состоянии средний импульс $\langle p\rangle$ должен быть равен нулю, поскольку нет предпочтительного направления (классически это было бы справедливо после усреднения по периоду финитного движения). Мы всегда будем определять, как в формуле (5.38) задачи 5.10, неопределённость ΔA величины A как среднеквадратичное отклонение

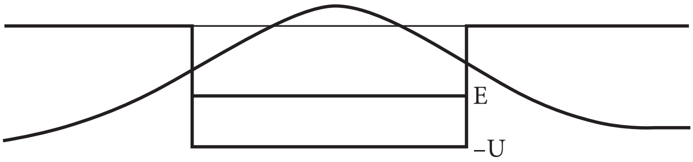

Рис. 5.7: Локализация волновой функции в мелкой яме

от её среднего значения $\langle A \rangle$,

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \qquad (5.44)$$

Здесь мы ограничимся только грубыми качественными оценками. Полная энергия связанного состояния должна быть отрицательной, если значение потенциала на бесконечности берётся равным нулю (начало отсчёта энергии). Кинетическая энергия даёт положительный вклад

$$\langle K \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{(\ Deltap)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2mL^2}. \qquad (5.45)$$

Мы ожидаем, что эта оценка может работать для основного состояния; в возбуждённых состояниях кинетическая энергия может быть больше.

С помощью уравнения (5.45) можно прийти к заключению, что любой притягивающий одномерный потенциал, стремящийся к нулю с обеих сторон (рис. 5.7), имеет по крайней мере одно связанное состояние (вспомните задачу 3.6). Чтобы прийти к этому заключению, мы должны понять, что *размер локализации* L в общем случае не совпадает с размером a потенциальной ямы. Если уровень *слабо связан*, то глубина проникновения в классически запрещённую область велика, так что волновая функция выходит за пределы ямы (*гало*, раздел 3.5). Результирующая величина L должна определяться самосогласованно из минимума полной энергии. Среднее значение потенциальной энергии не совпадает с типичной глубиной ямы U_0 — её следует умножить на вероятность того, что частица находится в яме. Эту вероятность можно оценить как отношение a/L, если полный размер связанного состояния $L > a$. Таким образом, полную энергию можно оценить как

$$E(L) = \langle K(L) + U(L) \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} + \frac{a}{L}(-U_0). \qquad (5.46)$$

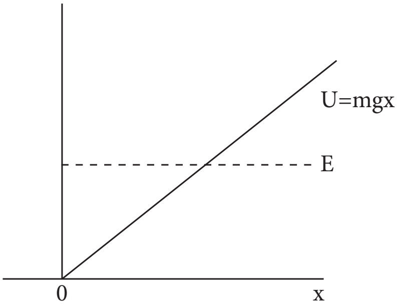

Рис. 5.8: Эффективный потенциал для задачи 5.11

Теперь мы можем минимизировать выражение (5.46) по отношению к неизвестной длине локализации L. Ноль производной dE/dL определяет

$$L = \frac{\hbar^2}{maU_0} \equiv \beta a, \quad \beta = \frac{(\hbar^2/ma^2)}{U_0}. \tag{5.47}$$

Безразмерный параметр β (мы встретим этот параметр в других ситуациях позже) даёт отношение кинетической энергии, какой она была бы для частицы, локализованной внутри ямы размера a, к потенциальной энергии (тоже внутри ямы). Если яма мелкая или потенциал слишком слабый, $\beta \gg 1$, тогда $L \gg a$ и частица находится в основном вне ямы. Минимальное значение энергии,

$$E(\beta a) = -\frac{ma^2U_0^2}{2\hbar^2} = -\frac{U_0}{2\beta}, \tag{5.48}$$

отрицательно и мало, $|E| \ll U_0$. Таким образом, связанное состояние в притягивающем потенциале с симметричными значениями на $\pm\infty$ всегда существует, но может быть очень слабо связанным в мелкой яме. Это согласуется с результатом (3.49) точно решаемой задачи 3.4, а параметр (3.49) — это $\xi = 1/\beta$. В задаче 3.6 мы видели, что в асимметричной яме не обязательно существует связанное состояние.

Задача 5.11

Рассмотрите частицу массы m в гравитационном поле Земли (вблизи поверхности, которая рассматривается как непроницаемая плоскость), (рис. 5.8).

а) Используя соотношение неопределённостей, оцените энергию и среднюю высоту над Землёй для основного состояния частицы. Дайте численные оценки для нейтрона.

б) Для электрона нужно также учесть электростатические эффекты. Предположив, что Земля — это идеальный проводник, оцените среднюю высоту электрона в основном состоянии над Землёй.

Решение.

а) Энергия частицы в гравитационном поле может быть записана как

$$E = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) \right\rangle, \quad U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leqslant 0, \\ mgx, & x > 0. \end{cases} \tag{5.49}$$

По соотношению неопределённости квантовая частица не может упасть на Землю; вместо этого она должна парить над поверхностью. Если средняя высота в основном состоянии $\sim L$, то типичная величина вертикального импульса $\hbar/L$ и среднее значение энергии может быть оценено как

$$E(L) = \frac{\hbar^2}{2mL^2} + mgL. \tag{5.50}$$

Эта функция имеет минимум при

$$L = \left(\frac{\hbar^2}{m^2 g}\right)^{1/3}. \tag{5.51}$$

Соответствующая энергия равна

$$E = \frac{3}{2}(mg^2\hbar^2)^{1/3}. \tag{5.52}$$

Правило квантования Бора — Зоммерфельда дало бы подобный результат с несколько большим численным коэффициентом ≈ 1.8 вместо 1.5 в уравнении (5.52). Согласно (5.50) и (5.51) $L \approx (2/3)(E/mg)$, т. е. меньше, чем классическая точка поворота E/mg; частица локализована *внутри* ямы. Средняя высота (5.51) убывает для тяжёлых частиц как $\sim m^{-2/3}$. Для нейтрона мы получаем высоту $L \approx 7\,\mu$м почти макроскопического масштаба (недавно это расстояние было измерено в связи с поиском *электрического дипольного момента* нейтрона).

б) Для электрона высота (5.51) была бы в 150 раз больше, $L \sim 1$ мм. Однако для электрона предыдущее рассмотрение неверно, поскольку оно не учитывает гораздо большей силы *электростатического изображения.* Для $L \sim 1$ мм эта сила, $e^2/(2L)^2$, на 7 порядков больше гравитационной, mg. Игнорируя гравитационную силу и повторяя ту же оценку с минимизацией, что и в части *а*, для одномерного электростатического

притяжения,

$$E = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{2L}, \tag{5.53}$$

мы получаем, как и следовало ожидать, длину, близкую к боровскому радиусу a,

$$L = \frac{\hbar^2}{2me^2} = \frac{1}{2}\,a. \tag{5.54}$$

Задача 5.12

Используя соотношение неопределённостей, оцените энергию основного состояния и размер локализации для

а) потенциала гармонического осциллятора,

$$U(x) = \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2; \tag{5.55}$$

б) крутого ангармонического потенциала,

$$U(x) = Cx^{2s}, \quad s = 2, 3, \ldots; \tag{5.56}$$

в) водородоподобного атома с зарядом ядра Ze.

Решение.

а) Для гармонического осциллятора

$$E \approx \hbar\omega, \quad L \approx \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{5.57}$$

б) В ангармоническом случае

$$E \sim \left(\frac{\hbar^{2s}C}{m^s}\right)^{1/(s+1)}, \quad L \sim \left(\frac{\hbar^2}{mC}\right)^{1/(2s+2)}. \tag{5.58}$$

При $s = 1$ этот результат совпадает с (5.57).

в) Для водородоподобного атома оценка случайно даёт точный результат

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}, \quad L = a \text{ (радиус Бора)}. \tag{5.59}$$

Задача 5.13

Рассмотрите атом с ядром заряда Z и двумя электронами с противоположными проекциями спина, но одинаковыми орбитальными волновыми функциями (в случае одинаковых проекций спина *Принцип исключения Паули* (главы IV.5 и IV.8) не позволил бы электронам занять одну и ту же орбиту). Оцените энергию основного состояния этого атома; не забудьте про кулоновское отталкивание между электронами.

Решение.

Пусть типичные радиусы для двух электронов будут r_1 и r_2. В основном состоянии их типичные радиальные импульсы, в соответствии с соотношением неопределённостей, $p_1 \sim \hbar/r_1$ и $p_2 \sim \hbar/r_2$. Минимальная энергия отталкивания для двух электронов может быть грубо оценена как $e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|_{max} = e^2/(r_1 + r_2)$. Тогда для энергии основного состояния получим оценку

$$E(r_1, r_2) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_1 + r_2}. \tag{5.60}$$

Электроны эквивалентны, и в основном состоянии должно быть $r_1 = r_2 \equiv r$. Энергия становится функцией r,

$$E(r, r) = \frac{\hbar^2}{mr^2} - 2e^2\frac{Z - (1/4)}{r}. \tag{5.61}$$

Минимум этой функции достигается при ($a = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус)

$$r = \frac{a}{Z_{eff}}, \quad Z_{eff} = Z - (1/4), \tag{5.62}$$

как если бы каждый электрон чувствовал кулоновское поле эффективного заряда Z_{eff}; ядерный заряд частично *экранирован* вторым электроном. Полная двухэлектронная энергия (5.61) для этого радиуса равна удвоенной энергии одноэлектронной орбиты в водородоподобном поле эффективного заряда (5.62),

$$E = -\frac{me^4}{\hbar^2}\, Z_{eff}^2 = -2Z_{eff}^2\,\mathrm{Ry}. \tag{5.63}$$

В этом случае мы предсказываем энергии связи (в Ry): 1.12 (отрицательный ион водорода H^-), 6.12 (атом He), 15.12 (положительный ион Li^+), 28.12 (Be^{++}), 45.12 (B^{+++}) и 66.12 (C^{++++}), в гораздо лучшем соответ-

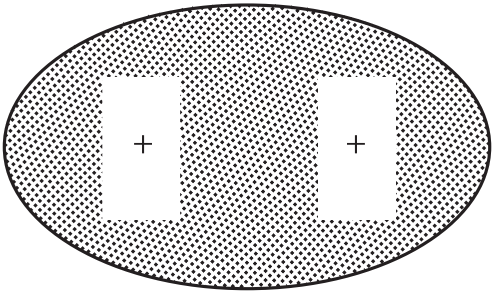

Рис. 5.9: Схематическая картина двухатомной молекулы

ствии с данными, чем можно было бы ожидать от такой простой оценки: эксперимент даёт 1.05, 5.81, 15.12, 28.12, 45.12 и 66.12 соответственно.

5.7 Классификация молекулярных возбуждений

Простые аргументы, основанные на соотношении неопределённостей, позволяют понять типичную иерархию стационарных состояний молекулы. Рассмотрим для простоты *двухатомную молекулу*, рис. 5.9. Два положительных иона отталкиваются кулоновскими силами, и связанное состояние возможно, только если существует и преобладает притяжение к заряду электронного облака. Пусть L будет средним расстоянием между ионами. Валентные электроны, отвечающие за молекулярную связь, должны быть локализованы в объёме такого размера. Тогда по принципу неопределённости электрон приобретает кинетическую энергию локализации,

$$E_{\rm el} \approx \frac{\hbar^2}{mL^2}, \tag{5.64}$$

где m — масса электрона, которая много меньше массы иона M. Средние значения кинетической и потенциальной энергии в стационарном состоянии — величины одного порядка (вспомните атом Бора и рассмотренные примеры; строго это обосновывается *теоремой вириала*, которая будет доказана позже). Таким образом, уравнение (5.64) даёт оценку по порядку величины для энергии, необходимой для перевода валентного электрона на более высокую орбиту, которая является *электронным возбуждением* молекулы. Поскольку размер молекул обычно составляет ангстремы (боровский радиус равен 0.5 $\mathring{A}$), электронные возбуждения требуют энергии 1–10 эВ.

Чтобы получить представление о возбуждениях, связанных с ионами, сначала подсчитаем число «тяжёлых» степеней свободы. Для N атомов в молекуле мы имеем $3N$ пространственных координат. Центр масс молекулы не имеет отношения к внутренним возбуждениям, т. е. у нас есть только $3(N-1)$ *внутренних* степеней свободы. Три из них соответствуют *вращениям* молекулы как целого. Это число независимых плоскостей вращения в трёхмерном пространстве (в d-мерном пространстве у нас было бы $d(d-1)/2$ плоскостей), или число углов, которые нужны, чтобы зафиксировать *ориентацию* тела. Таким образом, только $3(N-2)$ степеней свободы описывают относительные расстояния между атомами в молекуле.

В основном состоянии молекулы эти расстояния фиксированы минимизацией энергии. Конечно, они «фиксированы» только в среднем, в пределах соответствующей неопределённости. Эти расстояния (более точно, средние значения расстояний) образуют *скелет* молекулы. Пары ионов связаны химическими связями, и возможны квантовые возбуждения *колебательного* типа. Поскольку атомы взаимодействуют кулоновскими силами друг с другом и с электронным облаком, отдельные колебания вдоль каждой связи не являются правильными модами колебаний, они вовлекают в движение другие атомы. *Нормальные моды*, в значительной мере определяемые *симметрией* молекулярного каркаса, — это такие комбинации индивидуальных колебаний, где все атомы колеблются с одинаковой частотой. Как и в классической механике, число нормальных мод равно числу колебательных степеней свободы, $3N-6$.

Двухатомные, и вообще *линейные*, молекулы представляют собой исключительный случай (по нашему подсчёту, при $N=2$ мы бы вообще не имели колебаний). Как видно из рис. 5.9, ось молекулы является в этом случае *осью симметрии*. Вращение вокруг оси симметрии не соответствует квантовому возбуждению, оно не меняет волновую функцию. Классически это вращение не создаёт никаких зависящих от времени мультипольных полей и потому не ведёт к электромагнитному излучению. Если коллективное квантовое вращение вокруг оси симметрии невозможно, система с аксиальной симметрией имеет только два возможных типа вращений вокруг осей, перпендикулярных к оси симметрии (с равными моментами инерции). Поэтому в линейной молекуле число колебательных степеней свободы равно $3N-5$. В двухатомной молекуле остаётся одна колебательная степень свободы — колебания вдоль оси симметрии. Эти аргументы не запрещают возникновения момента импульса вдоль оси симметрии, но этот момент импульса не может генерироваться вращением молекулы как

целого — для этого нужно возбуждение отдельных частиц. Это заключение верно и для вращений аксиально деформированных атомных ядер [11].

Чтобы оценить *колебательную* частоту $\omega \sim \sqrt{\kappa/M}$ (1.16), где M — *приведённая масса* (1.45) двух ионов, а κ — коэффициент возвращающей силы, возьмём предельный случай большой амплитуды колебаний $\sim L$. Такое колебание полностью исказило бы электронную волновую функцию. Соответствующая потенциальная энергия $\sim \kappa L^2$ была бы порядка энергии (5.64), требуемой для электронного возбуждения,

$$\kappa L^2 \sim \frac{\hbar^2}{mL^2} \quad \rightsquigarrow \quad \kappa \sim \frac{\hbar^2}{mL^4}. \tag{5.65}$$

Из этой оценки мы получаем колебательную энергию

$$E_{\text{vib}} \sim \hbar\omega \sim \hbar\sqrt{\frac{\kappa}{M}} \sim \frac{\hbar^2}{\sqrt{mM}L^2}, \tag{5.66}$$

она меньше, чем электронная энергия (5.64), на множитель $(m/M)^{1/2}$.

Наконец, *вращательная* энергия может быть оценена через момент инерции $I \sim ML^2$ и квантованный момент импульса $\sim \hbar$ как

$$E_{\text{rot}} \sim \frac{\hbar^2}{I} \sim \frac{\hbar^2}{ML^2}. \tag{5.67}$$

Эти оценки дают иерархию возбуждений,

$$E_{\text{rot}} : E_{\text{vib}} : E_{\text{el}} \simeq \frac{m}{M} : \sqrt{\frac{m}{M}} : 1. \tag{5.68}$$

Адиабатический параметр $(m/M)^{1/2} \sim 10^{-2}$ определяет термодинамику газов: при абсолютном нуле молекулы находятся в основном состоянии; с ростом температуры сначала становятся активными вращательные степени свободы при $T \sim E_{\text{rot}}$, потом при $T \sim E_{\text{vib}}$ начинают возбуждаться колебания, а электронные степени свободы размораживаются только при довольно высокой температуре $\sim E_{\text{el}}$. Соответственно, мы переходим от инфракрасного к видимому и ультрафиолетовому излучению в молекулярных спектрах.

Приведённые оценки также подсказывают *адиабатический* подход к теории молекул и твёрдых тел (*приближение Борна — Оппенгеймера*). Присутствие малого параметра m/M подразделяет степени свободы на *быстрые*, электронные, и *медленные*, ионные. Быстрое движение можно сначала

рассмотреть в фиксированном поле ионов, а потом электронная энергия для данного расположения ионов вместе с прямым кулоновским отталкиванием ионов определяет эффективную потенциальную энергию ионов, которая позволяет определить оптимальную структуру молекулярного каркаса. Даже в атомных ядрах, где нет ни лёгких и тяжёлых степеней свободы, ни параметра, подобного m/M, возбуждения всё ещё приближённо следуют той же иерархии: вращения имеют наименьшие энергии, далее следуют колебания, а затем одночастичные (протонные и нейтронные) возбуждения. В общем случае существование низколежащих коллективных и более высоких одночастичных возбуждений типично для многочастичных систем.

5.8 Ширина уровня

Согласно концепции квантовых волн *стационарное* состояние с энергией E соответствует волновому процессу с частотой $\omega = E/\hbar$. Если зависимость $\Psi(t)$ от времени не является чисто гармонической, то эта функция описывает *нестационарный* процесс без определённой энергии. Аналогично импульсной волновой функции $\Phi(p)$ (уравнения (4.3) и (4.4)) преобразование Фурье $\Psi(t)$ из временного в частотное представление (5.2) даёт функцию $\Phi(\omega)$, которая должна интерпретироваться как амплитуда вероятности найти компоненту волнового пакета со значением энергии $E = \hbar\omega$.

Эксперименты показывают, что все *возбуждённые* состояния квантовых систем *нестационарны*. По прошествии некоторого времени система переходит в менее возбуждённые состояния, в конце концов оказываясь в основном состоянии. Только основные состояния изолированных систем могут быть строго стационарны и имеют бесконечное время жизни. Механизмы перехода могут быть различны. Переходы обычно связаны с взаимодействием с другими системами, такими как электромагнитное поле в радиационных переходах атомов (1.11). Атом не может быть изолирован от поля излучения, и это с неизбежностью ведёт к *конечным временам жизни* возбуждённых состояний.

Из многочисленных экспериментов (электромагнитное излучение атомов, молекул и ядер, радиоактивность и т. д.) известно, что с высокой точностью спонтанный распад может рассматриваться как *экспоненциальный*: число N возбуждённых объектов, «атомов», уменьшается со временем как

$$N(t) = N(0)\, e^{-\gamma t}, \tag{5.69}$$

где *скорость распада* γ не зависит от начального числа $N(0)$ атомов. Поскольку

$$\gamma = -\frac{1}{N}\,\frac{dN}{dt}, \tag{5.70}$$

эта величина имеет смысл вероятности распада в единицу времени для отдельного атома. В течение *среднего времени жизни*, равного

$$\tau = \frac{\int_0^\infty e^{-\gamma t} t\,dt}{\int_0^\infty e^{-\gamma t}\,dt} = \frac{1}{\gamma}, \tag{5.71}$$

число атомов уменьшается в среднем в e раз. Используя для оценки модель атомного электрона как классического осциллятора с частотой ω, мы можем оценить радиационное затухание [12] § 75:

$$\gamma \sim \frac{e^2\omega^2}{mc^3} \sim \omega\,\frac{e^2}{mc^2}\,\frac{1}{\lambda} = \omega\,\frac{r_e}{\lambda}, \tag{5.72}$$

где r_e — классический радиус электрона (1.40). Для видимого света это даёт скорость распада $\gamma \sim 10^{-7}\omega$, что означает, что время жизни τ велико по сравнению с периодом колебаний $\sim \omega^{-1}$, атомный осциллятор имеет *высокую добротность*. В таких случаях мы можем называть состояния *квазистационарными*.

Если вероятность $P(t)$ того, что атом остаётся в возбуждённом состоянии с энергией E_0, уменьшается экспоненциально,

$$P(t) = |\Psi(t)|^2 \propto e^{-\gamma t}, \quad t > 0, \tag{5.73}$$

то его волновая функция должна зависеть от времени как

$$\Psi(t) \propto e^{-(i/\hbar)E_0 t - (\gamma/2)t}, \quad t > 0. \tag{5.74}$$

Тогда можно говорить о *комплексной энергии* $\mathcal{E}$ нестабильного состояния,

$$\Psi(t) \propto e^{(-i/\hbar)\mathcal{E}t}, \quad \mathcal{E} = E_0 - \frac{i}{2}\Gamma. \tag{5.75}$$

Мнимая часть комплексной энергии связана со скоростью распада,

$$\mathrm{I}m\,\mathcal{E} = -\frac{\Gamma}{2}, \quad \Gamma = \hbar\gamma = \frac{\hbar}{\tau}. \tag{5.76}$$

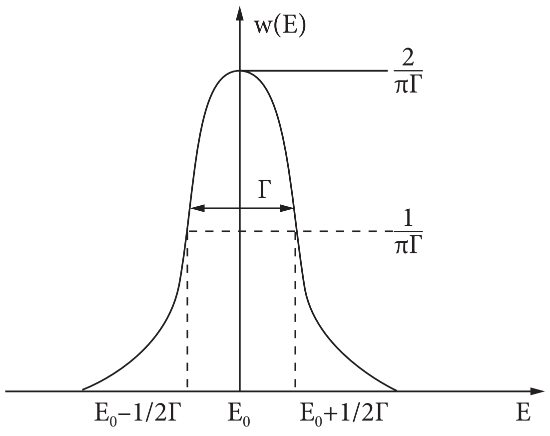

Рис. 5.10: Резонансная кривая квазистационарного состояния

Поскольку зависимость волновой функции нестабильного состояния от времени не является гармонической, настоящая энергия состояния не имеет определённого значения. Её Фурье спектр содержит много монохроматических компонент:

$$e^{-(i/\hbar)E_0 t-(\gamma/2)t} = i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,\frac{e^{-i\omega t}}{\omega-(E_0/\hbar)+(i/2)\gamma},\quad t>0. \tag{5.77}$$

Это тождество можно немедленно проверить, вычисляя интеграл замыканием контура интегрирования в нижней части комплексной плоскости ω, что возможно при $t>0$, когда вклад большой дуги пренебрежимо мал из-за множителя $\exp[\mathrm{Im}(\omega)t]$. В соответствии с нашей вероятностной интерпретацией плотность вероятности $w(\omega)d\omega$ нахождения компоненты с частотой ω (в интервале от ω до $\omega+d\omega$) определяется квадратом модуля соответствующей Фурье-компоненты,

$$w(\omega)\,d\omega = \frac{const}{|\omega-(E_0/\hbar)+(i/2)\gamma|^2}\,d\omega. \tag{5.78}$$

Переходя к энергии, вводя Γ (5.76) и нормируя вероятность так, что $\int dE\,w(E)=1$, мы приходим к *распределению Лоренца*

$$w(E)\,dE = \frac{1}{2\pi}\,\frac{\Gamma}{(E-E_0)^2+\Gamma^2/4}\,dE. \tag{5.79}$$

Лоренцева кривая (рис. 5.10) похожа на резонансную кривую классического осциллятора с частотой $E_0/\hbar$ и затуханием γ [13] § 26. Величина Γ, равная *ширине на половине максимальной высоты*, обычно называется *шириной уровня*. Эта величина характеризует энергетический интервал вблизи резонансного значения E_0 (*центра тяжести* резонансной кривой), в котором вероятность нахождения системы велика.

Таким образом, возбуждённые состояния *нестабильны* и их время жизни τ связано с шириной Γ уравнением (5.76). Для $\tau \to \infty$ кривая $w(E)$ становится узкой, $\Gamma \to 0$, и вытягивается вверх, как на рис. 5.10. Площадь под кривой остаётся равной 1, так что (3.25)

$$\Gamma \to 0: \quad w(E) \to \delta(E - E_0), \tag{5.80}$$

и мы приходим к *стационарному* состоянию с определённой энергией E_0. По своему смыслу ширина Γ характеризует неопределённость энергии распадающейся системы, а уравнение (5.76) представляет ещё один аспект соотношения неопределённостей энергия-время (5.7). Это общий результат; он не зависит от точного выполнения экспоненциального закона (5.69), который привёл к лоренцевой кривой. Более того, можно ожидать (раздел 9.6 из III тома) отклонений от экспоненциального закона. В самом деле, лоренцева кривая имеет длинные хвосты при $|E - E_0| \gg \Gamma$. При таком медленном убывании $w(E)$ среднеквадратичное отклонение энергии от средней,

$$(\Delta E)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, w(E)(E - E_0)^2, \tag{5.81}$$

расходится. Эта бесконечность является нефизической чертой распределения Лоренца. В любой реальной системе энергетический спектр не включает все энергии от $-\infty$ до $+\infty$, он обрезается снизу на энергии основного состояния. Поэтому распределение энергий нестабильной системы не может быть точно лоренцевым. Далёкие энергетические хвосты соответствуют согласно принципу неопределённости очень коротким временам. Начальная стадия распада должна отклоняться от экспоненты. Отклонения также ожидаются при очень больших временах $\gg \tau$, но внутри физически существенного интервала времени распад очень близок к экспоненциальному, и лоренцева зависимость обычно является хорошим приближением к реальности не очень далеко от центра резонансной кривой.

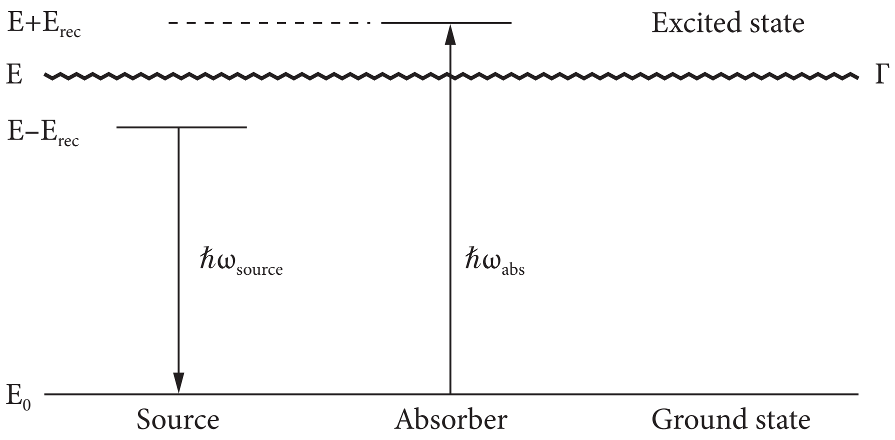

Рис. 5.11: Сохранение энергии и импульса в резонансной флуоресценции

5.9 Ширина линии и эффект Мёссба́уэра

В системах, совершающих радиационный переход между начальным состоянием i и конечным состоянием f, детектор зарегистрирует фотоны с частотой $\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$. В силу неопределённости энергии нестабильного состояния i испускаемые фотоны будут иметь разброс частоты порядка $\Gamma_i/\hbar$. Если конечное состояние также неустойчиво, то наблюдаемая *ширина спектральной линии* будет определяться суммой $\Gamma = \Gamma_i + \Gamma_f$.

Экспериментально измеренная ширина линии обычно превышает *естественную* ширину Γ. Тепловое движение атомов со скоростями $v_{\text{тепл.}}$ приводит к *доплеровскому уширению* $\Gamma_D \sim (v_{\text{тепл.}}/c)\hbar\omega$. *Столкновения атомов* также заметно уширяют спектральные линии, так как атомные состояния возмущаются от движения другого близко находящегося атома и этот нестационарный процесс нарушает монохроматичность волновой функции атома. Соответствующая ширина может быть оценена как $\Gamma_{\text{столкн.}} \sim \hbar/\tau_{\text{столкн.}}$, где $\tau_{\text{столкн.}}$ — это среднее время между столкновениями. Форма спектральной линии в среде также может быть отличной от той, которую имеет покоящийся одиночный атом.

Наблюдаемая ширина линии зависит от способа возбуждения системы. Один из возможных процессов возбуждения — это поглощение электромагнитной волны той же частоты, с которой впоследствии она будет испущена (*резонансная флуоресценция* или *резонансное излучение*). Если падающая волна обладает широким энергетическим спектром $\Delta E \gg \Gamma$, то все возбуждённые состояния могут быть заселены, а ширина линии излучения

совпадёт с естественной радиационной шириной Γ. Однако если падающая волна имеет очень узкий спектр, что может быть достигнуто с помощью лазера, $\Delta E \ll \Gamma$, то вследствие закона сохранения энергии возбуждаются только соответствующие Фурье-компоненты. В этом случае наблюдаемая форма линии излучения воспроизведёт спектр падающей волны, а её ширина будет *уже*, чем естественная ширина. Возбуждение при столкновениях, как правило, характеризуется широким спектром.

В отношении резонансной флуоресценции существует значительное отличие между атомами и ядрами (рис. 5.11). Предположим, что возбуждённое ядро *1* (*источник*) в состоянии покоя излучает фотон с энергией $\hbar\omega_{\text{источ.}}$ и рассмотрим, может ли этот фотон быть поглощён идентичным ядром *2*. Фотон уносит импульс $p = \hbar\omega_{\text{источ.}}/c$, а исходное ядро приобретает равный и противоположный по направлению импульс *отдачи* и, следовательно, кинетическую энергию отдачи $E_{\text{отдачи}}$. Если ядро переходит из возбуждённого состояния E в конечное состояние E_0, то из законов сохранения следует, что:

$$E = E_0 + \hbar\omega_{\text{источ.}} + E_{\text{отдачи}}, \quad E_{\text{отдачи}} = \frac{p^2_{\text{отдачи}}}{2M} = \frac{\hbar^2\omega^2_{\text{источ.}}}{2Mc^2}. \tag{5.82}$$

Для ядра с атомной массой $A \sim 50$ и энергией возбуждения порядка $E - E_0 \sim 1$ МэВ энергия отдачи (5.82) составляет величину порядка 10 эВ. Ядро *2* (*поглотитель*) принимает энергию и импульс фотона. Этот процесс (рис. 5.12) требует энергию фотона $\hbar\omega_{\text{поглот.}}$ больше, чем энергия возбуждения $E - E_0$ на ту же величину, что и энергия отдачи. В результате возникает рассогласование по энергии, равное

$$\hbar(\omega_{\text{поглот.}} - \omega_{\text{источ.}}) \approx 2E_{\text{отдачи}}. \tag{5.83}$$

Для низколежащих возбуждённых ядерных уровней со временем жизни, скажем, $\tau \sim 10^{-13}$ с, ширина линии излучения (5.76) равна $\Gamma \sim 10^{-2}$ эВ, т. е. меньше, чем рассогласование по энергии (5.83). Поэтому отдача вследствие закона сохранения импульса выбивает ядро за пределы резонанса. Если атомы двигаются, то доплеровское уширение может помочь, сдвигая резонанс в нужном направлении. Однако при комнатной температуре (для тех же ядер):

$$\Gamma_D \sim \frac{v_{\text{t}h}}{c}\hbar\omega \sim \sqrt{\frac{T}{Mc^2}}\,\hbar\omega \sim 10^{-5}\hbar\omega \sim 10\,\text{e}V, \tag{5.84}$$

т. е. это работает не всегда. Резонансная флюоресценция ядер наблюдается только при очень высоких температурах (или в случае специально двигающегося источника или поглотителя) или для уровней с аномально малым временем жизни (большой шириной).

Задача 5.14

Сделайте подобную оценку (используйте (5.72)) для того, чтобы показать возможность наблюдения резонансной флюоресценции в *атомной физике* при типичных условиях.

Для ядер резонансную флуоресценцию можно наблюдать с помощью *эффекта Мёссбауэра (1958)*. В кристаллической решетке сильно связанные ядра позволяют производить излучение и поглощение фотонов *без отдачи*, так как существует заметная вероятность того, что в процессе излучения или поглощения импульс отдачи будет принят всей решёткой в целом. Энергией отдачи в этом случае можно пренебречь из-за макроскопической массы кристалла. В отличие от свободного ядра ядро, связанное потенциалом решётки, локализовано и поэтому имеет широкое распределение по импульсу. В частности, существуют Фурье-компоненты волновой функции, которые создают дополнительный импульс (аналог эффекта Доплера), необходимый для компенсации отдачи. Подобный эффект был известен и до Мёссбауэра из физики медленных нейтронов, рассеивающихся на ядрах в кристалле. Эффект Мёссбауэра позволяет наблюдать очень узкие спектральные линии. С помощью эффекта Доплера, двигая источник или поглотитель с небольшими относительными скоростями порядка 1 мм/с, можно изменять отстройки для очень подробного исследования формы спектральных линий. Это даёт эффективный инструмент, чувствительный к крошечным относительным сдвигам уровней, например, из-за разницы в химическом составе окружающей среды или из-за слабого магнитного и даже гравитационного полей.

5.10 Виртуальные процессы и релятивистские эффекты

Из-за соотношения неопределённости энергия-время, точно определить энергию возможно только для процесса бесконечной продолжительности. Часто удобно разделить процесс на промежуточные этапы конечной длительности. При обсуждении резонансной флуоресценции (раздел 5.9) мы говорили о фотонах, испускаемых источником и поглощаемых поглотителем, как о реальных частицах с $E = \hbar\omega$ и импульсом $p = E/c$. Тем не менее если интервал времени Δt между актами излучения и поглощения

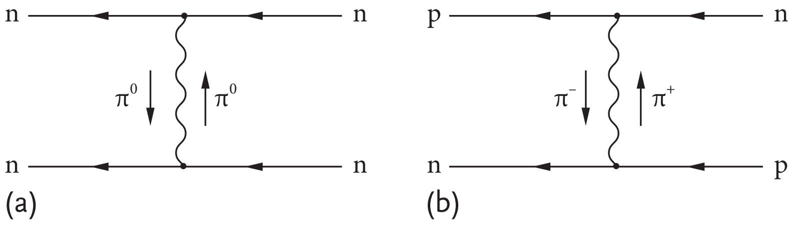

Рис. 5.12: Ядерные силы, возникающие через обмен нейтральными (a) и заряженными (b) мезонами

становится очень маленьким, то в силу соотношения неопределённости понятие фотона с определённой энергией становится бессмысленным. В таком приближённом описании граница между частицей с определёнными энергией и импульсом и промежуточным объектом, у которого недостаточно времени, чтобы приобрести свойства реальной частицы, становится размытой и различие носит только количественный, а не качественный характер.

В таких ситуациях, мы говорим о *виртуальных* процессах или виртуальных состояниях системы. Если, как в приведённом выше примере, «новая» частица появляется на короткий промежуток времени, то она тоже может называться виртуальной. Такой подход облегчает квантовое описание сложных состояний, например, из двух атомов (или ядер) и электромагнитного поля, как в случае флуоресценции. Закон сохранения энергии выполняется для всей системы в целом. Но в течение виртуального процесса энергия каждой подсистемы не имеет определённого значения. Это источник самой идеи о нестабильных состояниях, ширинах уровней и т. д. Такое приближенное описание удобно из-за его непосредственной связи с экспериментальными наблюдаемыми. Другие законы сохранения: импульса, момента импульса, заряда и т. д., всё ещё выполняются на каждом шаге. Есть ещё один тип описания, часто используемый в релятивистской квантовой теории, с законом сохранения энергии, выполняющемся на каждом шаге, но без стандартного соотношения (1.6) между энергией и импульсом виртуальной частицы. Другими словами, в этом случае масса виртуальной частицы может принимать произвольные значения.

Задача 5.15

Известно, что радиус действия сильного взаимодействия между двумя нуклонами порядка $R \sim (1 \div 2) \cdot 10^{-13}$ см. Оцените массу самых лёгких

мезонов в предположении, что ядерные силы действуют (рис. 5.12) путём обмена *мезонами*.

Решение.

Излучение реального мезона единичным нуклоном запрещено законом сохранения энергии-импульса. Взаимодействие протекает как *виртуальный* процесс конечной продолжительности τ. Для того чтобы нуклоны провзаимодействовали, виртуальный мезон должен иметь достаточно времени, чтобы пройти расстояние между ними R, $R < c\tau$. При наличии виртуальных мезонов массы m неопределённость энергии системы равна $\Delta E \sim mc^2 \sim \hbar/\tau$. Максимальное расстояние, которое мезон может пролететь, определяет радиус действия ядерных сил:

$$R \sim c\tau \sim \frac{\hbar}{mc}. \tag{5.85}$$

Другими словами, обмен квантами массы m связывает частицы на расстоянии порядка комптоновской длины волны переносчика в соответствии с (1.39). Для виртуального фотона $m = 0$ сила является дальнодействующей (кулоновской). Нуклон-нуклонное взаимодействие на расстоянии $R \sim 2\,\text{фм}$ (5.85) предсказывает существование переносчика с массой $m \sim 200\,m_e$. Таким образом и было предсказано (Хидэки Юкава, 1935) существование π-мезонов (*пионов*). Обмен пионами приводит к потенциалу Юкавы (1.50), который, однако, не достаточно силён для связывания двух нуклонов (задача 1.8). Существование связанного протон-нейтронного состояния, *дейтрона*, обеспечивается дополнительным обменом более тяжелыми мезонами.

При более строгом рассмотрении мы должны использовать не отдельные нуклоны и виртуальные мезоны, а исследовать сложную систему взаимодействующих нуклонов и мезонного поля, причём эта система в целом будет иметь в основном состоянии определённую энергию. Подобная идея может быть использована и при рассмотрении туннелирования (раздел 2.7). Виртуальные состояния возможны, когда частица попадает в запрещённую область под барьером на короткое время Δt. Это приводит к флуктуации энергии $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$. Для малых Δt «мгновенная» энергия частицы может превышать высоту барьера, и частица может преодолеть («перепрыгнуть») запрещённую область. Это также исключает возможность «поймать» частицу под барьером, так как это потребует дополнительной энергии, большей, чем высота самого барьера. Нужно ещё раз подчеркнуть, что при точном решении квантовых задач в понятии виртуального состояния нет необ-

ходимости. Полная волновая функция системы даёт всю информацию, позволяющую, в частности, найти вероятности процессов туннелирования.

В задаче 5.15 существование предельной скорости распространения сигнала c имеет ключевое значение. В общем случае в релятивистской области появляются новые ограничения поверх обычного квантового соотношения неопределённости § 1 в ссылке [14]. Групповая скорость релятивистского волнового пакета со средней энергией E и средним импульсом p равна $v = pc^2/E < c$. Так как разбросы энергии и импульса пакета связаны, $\Delta E \sim v\,\Delta p$, а время прохождения удовлетворяет $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$, то мы приходим к новому ограничению (которое исчезает в пределе $c \to \infty$):

$$\Delta p \cdot \Delta t \geqslant \frac{\hbar}{c}. \tag{5.86}$$

Это определяет оптимальную точность измерения импульса при заданной продолжительности процесса измерения.

Другое соотношение ставит ограничения на само понятие *одночастичного* состояния. Для того чтобы понятие частицы массы m имело смысл, неопределённость энергии состояния должна заведомо быть меньше, чем mc^2, а, следовательно, продолжительность измерения $\Delta t > \hbar/mc^2$. Уравнение (5.86) задаёт границу неопределённости импульса $\Delta p \sim mc$, и, следовательно, частицы в состоянии покоя не могут быть локализованы лучше, чем в пределах своей комптоновской длины:

$$\Delta x \geqslant \frac{\hbar}{\Delta p} \geqslant \frac{\hbar}{mc} = \lambda_C. \tag{5.87}$$

При попытке лучшей локализации, неопределённости энергии и импульса могут возрасти настолько, что становится энергетически возможным рождение новых частиц, и задача теряет одночастичный характер. В этом случае вместо квантовой механики нужно использовать полную релятивистскую квантовую теорию поля.

5.11 Ещё раз о пространственном квантовании

Как уже отмечалось в разделе 1.8, момент импульса квантовой системы квантуется и равен целому или полуцелому (в случае спина) числу, умноженному на $\hbar$. В тексте мы всюду измеряем момент импульса (сравнить (4.34) и (4.68)) в единицах $\hbar$. Безразмерный вектор момента импульса мы по-прежнему обозначаем как $\vec{\ell}$.

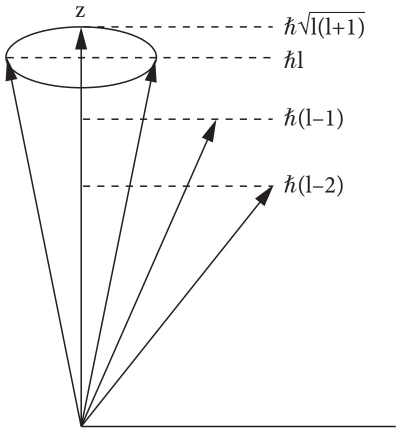

Рис. 5.13: Пространственное квантование момента импульса и картина прецессии

Если экспериментально выделить направление z в пространстве и измерить, например, с помощью установки Штерна — Герлаха, проекции углового момента $\ell_z = m$ на это направление, то возможны $(2\ell + 1)$ результатов измерения значения m, которое меняется от $-\ell$ до $+\ell$. Вследствие изотропности пространства аналогичное квантование будет обнаружено при *любом выборе* оси. Так как максимально возможная длина проекции — ℓ, то было бы естественно предположить, что длина вектора момента импульса равна $\sqrt{\vec{\ell}^2} = \ell$. Однако такое предположение несовместимо с соотношением неопределённости.

Предположим, что структура исследуемых частиц не имеет внутренних корреляций с каким-либо выделенным направлением. Применив в опыте Штерна — Герлаха поле с различной ориентацией, мы с одинаковой вероятностью получим все возможные значения проекций моментов (конечно для каждой частицы можно измерить только одну конкретную проекцию). Среднее значение $\vec{\ell}^2$ по большому числу измерений (здесь измерения относятся к разным экспериментальным настройкам), в силу изотропии, равно

$$\overline{\vec{\ell}^2} = \overline{\ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2} = 3\overline{\ell_z^2}. \tag{5.88}$$

Так как возможные результаты квантованы, то среднее значение равно

$$\overline{\vec{\ell}^2} = \frac{3}{2\ell + 1} \sum_{m=-l}^{\ell} m^2 = \frac{6}{2\ell + 1} \sum_{m=1}^{\ell} m^2. \tag{5.89}$$

Вычисляя сумму квадратов целых чисел, мы получим

$$\overline{\vec{\ell}^2} = \frac{6}{2\ell+1}\,\frac{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}{6} = \ell(\ell+1). \tag{5.90}$$

Отсюда получается, что среднее значение «длины» вектора момента импульса равно $\sqrt{\ell(\ell+1)}$ и, следовательно, всегда *превышает* максимальную проекцию ℓ этого вектора на любое направление (рис. 5.13).

Этот результат (он также верен и в случае квантования момента импульса по полуцелым числам) может показаться странным. Его следует интерпретировать в духе соотношения неопределённости. Если существует состояние, в котором вектор $\vec{\ell}$ в точности направлен вдоль определённой оси, то можно выбрать это направление в качестве оси квантования и измерение будет обеспечивать проекцию на этом направлении равную максимально возможному значению и совпадающую с $\sqrt{\vec{\ell}^2}$. В действительности такое состояние не существует. У нас есть новая пара связанных переменных ℓ_z и азимутальный угол φ. В классической механике они являются канонически сопряжёнными, по аналогии с импульсом p_x и координатой x. В квантовой механике есть сходство между оператором импульса (4.29) и оператором момента импульса (4.34) и (4.68). Они оба выражены как производные по координатам, соответственно линейной и угловой, а в более строгом подходе они являются генераторами сдвига и поворота. Поэтому естественно ожидать соотношение неопределённости в виде $\Delta(\hbar\ell_z)\cdot\Delta\varphi \sim \hbar$. Если это так, то состояние с вектором момента импульса, полностью ориентированным вдоль определённой оси квантования, будет аналогом состояния плоской волны с точно определённым импульсом p. В этом состоянии азимутальный угол будет неопределённым. Однако два взаимосвязанных условия делают это предположение неверным.

Во-первых, компоненты ℓ_x и ℓ_y в этом предельном случае будут полностью установлены (равны нулю), что противоречило бы принципу неопределённости для этих компонент, так как полярный угол тоже имеет определённое значение $\theta = 0$. Во-вторых, неопределённость $\Delta\varphi$ не может быть бесконечной, как того требует форма соотношения неопределённости, предложенная выше. Действительно, угол является *компактной* координатой, определённой только на интервале 2π, и нет никакого смысла говорить о его бесконечной неопределённости. Более того, любая однозначная функция от φ должна быть *периодическая* с периодом 2π, как мы уже сталкивались с этим при создании полного набора азимутальных функций (4.71). Для всех таких функций неопределённость угла, безусловно, конечна (равна

$\pi/\sqrt{3}$ независимо от выбора интервала длиной 2π).

Различие между импульсом с его бесконечным диапазоном в декартовых координатах и момента импульса с его компактной областью определения угла с точки зрения геометрии или *топологии* имеет определяющее значение. Формально это видно также и потому, что операторы $\hat{p}_k$ компонент импульса коммутируют (4.57), в то время как компоненты момента импульса $\hat{\ell}_k$ — нет (4.37). Результат от двух последовательных сдвигов вдоль произвольных направлений не зависит от порядка операций. В противоположность этому результат двух вращений вокруг разных осей действительно зависит от их порядка. Группа вращений в трехмерном пространстве является *неабелевой*. Многочисленные последствия этого будут освещены в процессе изложения курса.

Так как точное выравнивание вектора $\vec{\ell}$ невозможно, то его «длина» всегда больше, чем максимальная величина его проекции. Ближайшим классическим аналогом является явление *прецессии* вектора момента импульса вокруг оси квантования (рис. 5.13). Угол конуса прецессии фиксируется вместе с проекцией ℓ_z. Поперечные компоненты усредняются и равны нулю, $\langle \ell_x \rangle = \langle \ell_y \rangle = 0$, но их среднеквадратичные флуктуации не исчезают:

$$\langle \ell_x^2 \rangle = \langle \ell_y^2 \rangle = \frac{1}{2}\left[\langle \vec{\ell}^2 \rangle - \langle \ell_z^2 \rangle\right] = \frac{1}{2}[\ell(\ell+1) - m^2] > 0. \tag{5.91}$$

Здесь мы забежали вперёд, определив среднее по возможным направлениям, которое обсуждали ранее, с квантово-механическим средним значением. Позже мы рассмотрим алгебру угловых моментов более подробно и строго выведем свойства, которые обсуждаются здесь только в упрощенной форме.

Если сделать формальный предельный переход $\hbar \to 0$, то соотношения неопределённости перестают накладывать какие-либо ограничения на наблюдаемые величины. Останавливается расползание волнового пакета (5.26), и все физические величины могут иметь определённые значения одновременно. Как мы уже упоминали, постоянная Планка просто предоставляет числовую шкалу для проявления основанных на симметрии квантовых законов. Если эта шкала намного меньше, чем та, которая используется для физических измерений, то квантовые неопределённости становятся несущественными. Для углового момента этот предел может быть достигнут следующим образом: нужно уйти в сторону больших (макроскопических) квантовых чисел, $\ell \to \infty$, когда $\ell(\ell+1) \approx \ell^2 = (\ell_z^2)_{\max}$. В этом случае восстанавливается классическое понятие ориентации вдоль выбранного направления. Затем мы полагаем $\hbar \to 0$ таким образом, что величина углового момента $\hbar\ell$ остаётся конечной. Спин частицы не имеет

макроскопического предела, а вектор спина $\hbar\mathbf{s}$ величины $\hbar/2$

$$\mathbf{s}^2 = s(s+1) = \frac{3}{4} \tag{5.92}$$

исчезает в классическом пределе. Однако он проявляется, например, при ферромагнетизме, когда в конкретном направлении выстаивается макроскопически значимое число спинов.

В заключение этой главы, необходимо подчеркнуть, что квантовая теория основана на существовании дополнительных физических величин и комплементарных типов экспериментов. Эта комплементарность, в свою очередь, отражает специфические свойства симметрии наблюдаемых величин. Комплементарные эксперименты можно рассматривать как различные проекции одного и того же состояния микрообъекта на различные физические ситуации. В некотором смысле это аналог различных систем отсчёта в теории относительности, только вместо преобразования Лоренца есть правила преобразования квантовых амплитуд между различными типами измерений. Но интерпретация результатов является вероятностной, так что полная волновая функция может быть изучена только в серии экспериментов, проводимых в одинаковых условиях. Соотношения неопределённости — это численное выражение принципа дополнительности, т. е. взаимосвязи фундаментальных симметрий на квантовом уровне.

Дополнительная литература: [15–19].

Квантовые явления происходят не в гильбертовом пространстве, они происходят в лаборатории.
Цитата приписывается *Ашеру Пересу*, *«Physics Today»*, Август 2005, с. 66.

Глава 6

Гильбертово пространство и операторы

6.1 Амплитуда вероятности

Познакомившись с квантовыми идеями в наших вступительных лекциях, мы можем попытаться взглянуть на квантовую теорию с более общей точки зрения. Некоторые темы нами уже рассматривались. Здесь мы обсудим их в более формальном подходе, введя практическую математику квантовой теории.

Вопрос, на который должна ответить теория, может быть сформулирован в терминах вероятностей результатов различных экспериментов. Пусть в момент времени t_0 приготовлено квантовое состояние Ψ_A (как всегда, мы называем *«состоянием»* квантовую систему в её невозмущённой эволюции) с определёнными значениями (совместимых) переменных A. Мы интересуемся *вероятностью* $P(B,t;A,t_0)$ измерения в момент времени t определённых значений переменных B (также взаимно совместимых и, вообще говоря, отличных от A). Если переменные множества B имеют непрерывный спектр возможных значений, мы должны говорить о *плотности вероятности* $P(B)$ различных значений B, так что вероятность нахождения B в интервале от B до $B+dB$ равна $P(B)dB$. Для простоты мы будем использовать обозначения для дискретного спектра, хотя расширение на непрерывный спектр не представляет труда. Как правило, можно рассматривать только дискретный спектр, выполняя предельный переход к континууму в конце; часто это будет предполагаться в дальнейшем без дополнительных пояснений.

Искомая вероятность является действительной неотрицательной величиной, которая может быть представлена *комплексной амплитудой вероятности* $\langle B,t|A,t_0\rangle$,

$$P(B,t;A,t_0) = |\langle B,t|A,t_0\rangle|^2. \tag{6.1}$$

Полная *фаза амплитуды* не влияет на экспериментально наблюдаемые величины. Определение (6.1) следует читать справа налево: состояние, первоначально характеризуемое набором A, изменяется со временем в соответствии с квантовыми законами, затем подлежит измерению распределение переменных B. Амплитуда, которая появляется в уравнении (6.1), будет называться амплитудой вероятности состояния A в *B-представлении*. Выбор представления зависит от нашей цели (т. е. выбора представляющих интерес величин B и соответствующей экспериментальной установки). Амплитуда $\langle B|A\rangle$ (временны́е аргументы могут быть опущены, если время не важно) является аналогом классической амплитуды волны.

Каждое измерение B будет давать в результате некоторое число. При повторении измерений в одинаковых условиях мы получаем распределение вероятности. Было бы естественно попытаться нормировать вероятности (6.1) таким образом, чтобы их сумма (интеграл в случае сплошного спектра) по всем возможным значениям B была равна 1,

$$\sum_B P(B,t;A,t_0) = 1. \tag{6.2}$$

Если эта сумма (интеграл) сходится, мы всегда можем получить нормировку (6.2) путём умножения всех амплитуд на численный множитель, который не зависит от B. В случае возникновения расходимости амплитуды не нормируются, но *относительные* вероятности различных значений B по-прежнему имеют смысл.

6.2 Суперпозиция и интерференция

Рассмотрим вероятность события, которое может произойти в результате перехода системы через ряд независимых неперекрывающихся промежуточных состояний (может быть получено разными путями). Классический подход состоял бы в следующем. Пусть A — выпускник средней школы. Мы интересуемся вероятностью успешного получения, им или ей, степени бакалавра B после окончания колледжа C. Тогда очевидно, что

$$P(B;A) = \sum_C P(B;C)\,P(C;A), \tag{6.3}$$

где $P(C;A)$ есть вероятность поступления A в колледж C, а $P(B;C)$ является вероятностью получения степени по окончании этого колледжа. Это классическое сложение и умножение вероятностей.

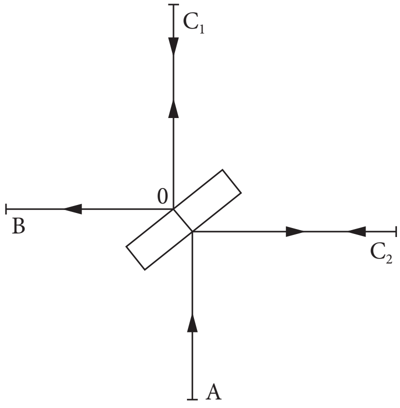

Рис. 6.1: Схема интерферометра с расщеплённым лучом

В квантовой механике классическое правило (6.3) неверно. Возьмём, к примеру, устройство типа фотонного интерферометра (рис. 6.1). Пусть R — доля интенсивности, отражённая от центральной пластины O и T — коэффициент прохождения. Тогда мы имеем

$$P(C_1; A) = T, \quad P(B; C_1) = R, \quad P(C_2; A) = R, \quad P(B; C_2) = T, \tag{6.4}$$

и полная вероятность достижения точки B есть, в соответствии с уравнением (6.3),

$$P(B; A) = 2RT \tag{6.5}$$

независимо от разности хода лучей. Очевидно, что правило (6.3) не учитывает *разности фаз*, зависящей от длины пути лучей, и, следовательно, не включает эффектов интерференции. *Относительную фазу* расщеплённых пучков не следует путать с общей фазой амплитуды $\langle B|A\rangle$, которая в самом деле не имеет значения.

Задача 6.1

Получите правильный волновой результат

$$P(B; A) = 2RT\left[1 + \cos\left(\frac{E\tau}{\hbar}\right)\right], \tag{6.6}$$

где $E/\hbar$ — частота фотона и $c\tau$ — разница длин пути через C_1 и C_2. Следует отметить, что при определённых условиях эта вероятность может быть вдвое больше, чем классический результат (6.5); однако она может также

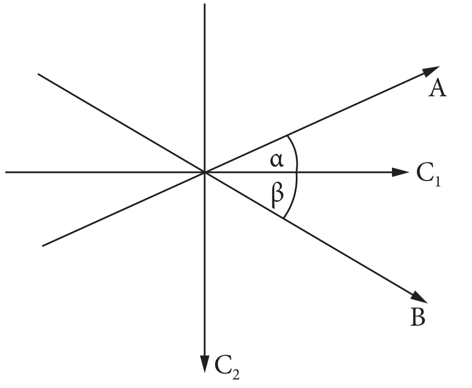

Рис. 6.2: Иллюстрация принципа суперпозиции с помощью простого эксперимента с поляризатором **A** и анализатором **B**

обращаться в нуль. Это схематическое изображение интерференционного компаратора, который позволяет измерять расстояния при известной частоте света.

На квантовом языке падающий пучок в этом примере соответствует состоянию фотона с определённым (по величине и направлению) вектором импульса. После того как луч был разделён, фотонное состояние сохраняет величину импульса и энергию, хотя и не сохраняет направление (макроскопическое устройство поглощает импульс отдачи, и мы пренебрегаем энергией отдачи (см. раздел 5.9)). Так как общая система фотона и интерферометра является замкнутой, у нас по-прежнему есть *состояние* системы в том смысле, о котором мы говорили в начале этого раздела. Однако теперь это состояние представляет собой *суперпозицию* состояний, соответствующих двум определённым направлениям распространения. Если бы дополнительный детектор был включён в плечи интерферометра, можно было бы поймать фотон в одном из них, но никогда это не было бы «частью» фотона. Тем не менее, подобно тому, что мы видели в эксперименте с двумя щелями в разделе 5.2, это дополнительное измерение полностью нарушило бы интерференцию двух компонент путём фиксации одной из возможностей.

Таким образом, выполняется *принцип суперпозиции*: состояние, являющееся членом одного набора состояний, можно рассматривать как суперпозицию состояний из другого набора. И наоборот, любая суперпозиция снова является одним из возможных состояний системы. Правильное математическое выражение принципа суперпозиции можно найти с помощью

простого примера (см. рисунок 6.2). Пусть свет поляризован в направлении **A**, в то время как мы интересуемся интенсивностью света, прошедшего через анализатор **B**. Согласно известному оптическому закону (или, можно сказать, «в соответствии с экспериментом») эта интенсивность равна

$$P(B;A) = \cos^2(\alpha + \beta). \tag{6.7}$$

Но, согласно принципу суперпозиции падающий пучок может быть представлен в виде комбинации волн, поляризованных в двух взаимно перпендикулярных *базисных* направлениях $\mathbf{C}_1$ и $\mathbf{C}_2$. Анализаторы, соответствующие этим двум направлениям, будут пропускать интенсивности

$$P(C_1;A) = \cos^2\alpha \quad \text{и} \quad P(C_2;A) = \cos^2(\alpha + \pi/2) = \sin^2\alpha. \tag{6.8}$$

Для этих возможностей доли интенсивности, прошедшей через финальный анализатор **B**, равны

$$P(B;C_1) = \cos^2\beta \quad \text{и} \quad P(B;C_2) = \cos^2(\pi/2 - \beta) = \sin^2\beta. \tag{6.9}$$

Мы опять видим, что соотношение (6.3) противоречит уравнениям (6.7)–(6.9). Правильный результат (6.7) получается, если ввести *амплитуды* (6.2) с соответствующими *относительными фазами*

$$\langle C_1|A\rangle = \cos\alpha, \quad \langle C_2|A\rangle = \cos(\alpha + \pi/2) = -\sin\alpha, \tag{6.10}$$

$$\langle B|C_1\rangle = \cos\beta, \quad \langle B|C_2\rangle = \cos(\pi/2 - \beta) = \sin\beta. \tag{6.11}$$

Тогда

$$\begin{aligned}\langle B|C_1\rangle\,\langle C_1|A\rangle + \langle B|C_2\rangle\,\langle C_2|A\rangle &= \cos\alpha\,\cos\beta - \sin\alpha\,\sin\beta = \\ &= \cos(\alpha+\beta) = \langle B|A\rangle.\end{aligned} \tag{6.12}$$

Мы видим, что *амплитуды* вероятности с их относительными фазами, а не сами вероятности должны быть скомбинированы определенным образом, чтобы дать правильную интерференционную картину. Следовательно, вместо классического правила (6.3) принцип суперпозиции может быть записан в виде

$$\langle B|A\rangle = \sum_C \langle B|C\rangle\,\langle C|A\rangle \tag{6.13}$$

или в более полной форме и для непрерывного спектра:

$$\langle B,t|A,t_0\rangle = \int dC\,\langle B,t|C,t'\rangle\,\langle C,t'|A,t_0\rangle. \tag{6.14}$$

Здесь t' — произвольный промежуточный момент времени (без интегрирования по t'). Для получения вероятности $P(B;A)$ берём квадрат суммы (6.13). Это даёт парциальные вероятности каждого пути вместе с интерференционными членами между путями. Классический рецепт (6.3) восстанавливается, если есть множество промежуточных состояний C с *хаотическими фазами* амплитуд. Тогда будет иметь место значительное сокращение перекрёстных членов, в пределе останутся только квадраты отдельных амплитуд, и мы возвратимся к классическому сложению вероятностей (6.3). Таким образом, классическая теория восстанавливается в результате полного *разрушения некогерентности* квантовых амплитуд.

6.3 Векторы состояния

Изучая то же состояние Ψ_A, можно интересоваться результатом измерения набора динамических переменных, который отличается от B (например, D). Это приводит к амплитуде $< D|A >$ того же состояния A в D-представлении. Если принцип суперпозиции (6.13) универсален, то, используя новое представление, но тот же базисный набор промежуточных состояний C, получим

$$\langle D|A\rangle = \sum_C \langle D|C\rangle\,\langle C|A\rangle. \tag{6.15}$$

Мы заключаем, что независимо от представления имеет место равенство

$$\langle \ldots|A\rangle = \sum_C \langle \ldots|C\rangle\,\langle C|A\rangle, \tag{6.16}$$

где вместо многоточий можно подставить характеристики любого используемого представления. Последнее выражение похоже на разложение вектора $\mathbf{a}$ в некотором N-мерном векторном пространстве по базису $\{\mathbf{c}_n\}$:

$$\mathbf{a} = \sum_n \mathbf{c}_n\,(\mathbf{c}_n\cdot\mathbf{a}). \tag{6.17}$$

Выбор представления $B, D, \ldots$ подобен проектированию вектора $\mathbf{a}$ на фиксированный вектор $\mathbf{b}$, $\mathbf{d}, \ldots$ по аналогии с уравнениями (6.13) и (6.15):

$$(\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}) = \sum_n (\mathbf{b}\cdot\mathbf{c}_n)(\mathbf{c}_n\cdot\mathbf{a}). \tag{6.18}$$

Различные представления служат в роли различных систем координат или различных точек зрения на одно и то же состояние A. «Промежуточные состояния» C — это на самом деле состояния той же системы, используемые в качестве базисных векторов. Исходное состояние представлено в (6.16) в виде линейной комбинации этих базисных векторов (принцип суперпозиции), и амплитуда каждой компоненты, присутствующей в суперпозиции, задаётся проекцией исходного вектора на соответствующий базисный вектор (сравните с рис. 6.2).

Итак, каждому состоянию A квантовой системы мы можем сопоставить *вектор состояния*, обозначаемый как $|A\rangle$ в абстрактном *векторном пространстве*, которое включает все возможные состояния системы. Это многообразие называется *гильбертовым пространством.* Компонентами вектора $|A\rangle$ являются амплитуды вероятности $\langle B_1|A\rangle$, $\langle B_2|A\rangle, \cdots$ для всех возможных результатов измерения B_i переменных B (B-представление) или в другой системе координат амплитуды вероятности $\langle D_1|A\rangle$, $\langle D_2|A\rangle, \cdots$ (D-представление). Существуют *полные наборы* состояний промежуточных векторов $|C\rangle$, которые могут быть использованы в качестве базиса, и принцип суперпозиции (6.16), по существу, является утверждением *полноты* набора, что и позволяет нам использовать этот набор как базис

$$|A\rangle = \sum_C |C\rangle\,\langle C|A\rangle \tag{6.19}$$

аналогично обычным векторам (6.17).

Амплитуда вероятности нахождения в состоянии $|A\rangle$ частицы в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t — это просто наша прежняя волновая функция в *координатном* представлении $\Psi_A(\mathbf{r}, t)$. На новом языке это «координатная» компонента вектора состояния $|A\rangle$:

$$\Psi_A(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}, t|A\rangle. \tag{6.20}$$

Точно так же «импульсная» компонента того же вектора состояния — это волновая функция $\Phi_A(\mathbf{p}, t)$ в *импульсном* представлении,

$$\Phi_A(\mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p}, t|A\rangle. \tag{6.21}$$

Многие из наших предыдущих результатов можно переписать в терминах соотношений между векторами состояния. Например, уравнение эволюции во времени (3.38) состояния $\Psi(x,t)$ — это то же самое, что принцип суперпозиции (6.14) в координатном представлении, где промежуточные состояния берутся также в координатном представлении,

$$\langle x,t|\Psi\rangle = \int dx'\langle x,t|x',t'\rangle\langle x',t'|\Psi\rangle. \tag{6.22}$$

Пропагатором в этих обозначениях записывается как

$$G(x,t;x't') \equiv \langle x,t|x',t'\rangle. \tag{6.23}$$

Гильбертово пространство является *комплексным*, поскольку, как правило, амплитуды комплексны. Число независимых компонент $\langle B|A\rangle$ может быть конечным или бесконечным в зависимости от спектра соответствующих динамических переменных.

6.4 Геометрия гильбертового пространства*

Сравнение принципа суперпозиции (6.19) с разложением по базису обычного вектора (6.17) показывает, что амплитуды вероятности $\langle C|A\rangle$ — это проекции вектора $|A\rangle$ на другой вектор $|C\rangle$ (в данном случае принадлежащий выбранному базису). В более математической терминологии эти амплитуды являются *внутренними (скалярными)* произведениями изучаемого вектора $|A\rangle$ и вектора $|C\rangle$, используемого для идентификации одного из возможных путей эволюции исходного состояния. В реальном векторном пространстве это действительно «нормальное» скалярное произведение $(\mathbf{c}_n \cdot \mathbf{a}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}_n)$ (см. уравнение (6.17)). В квантовой механике, однако, амплитуды являются комплексными. Вероятность $|\langle C|A\rangle|^2$ есть *перекрытие* этих двух векторов состояния, и, таким образом, она должна быть равна вероятности обратного эксперимента $|\langle A|C\rangle|^2$, где мы начинаем с состояния, зафиксированного как $|C\rangle$, и измеряем его характеристики с помощью переменных A в A-представлении. Соответствующие амплитуды могут отличаться фазами, и предполагается, что они являются *комплексно сопряжёнными*. Как мы увидим в ближайшее время, это согласуется с тем, что мы уже использовали в конкретных примерах в координатном и импульсном представлениях. Во всех случаях комплексное сопряжение отражает обратное развитие событий и, следовательно, имеет отношение к преобразованию обращения времени (см. раздел 8.1).

Скалярное произведение двух векторов в гильбертовом пространстве

$$(\Psi_B, \Psi_A) \equiv \langle B|A\rangle, \qquad (6.24)$$

где мы показали два эквивалентных обозначения, может быть определено для каждой упорядоченной пары $|B\rangle$ и $|A\rangle$ как функционал, для которого справедливы следующие правила:

(i) условие взаимности:

$$(\Psi_B|\Psi_A) = (\Psi_A, \Psi_B)^*; \qquad (6.25)$$

(ii) линейность по отношению ко *второму* аргументу:

$$(\Psi_B, \alpha\Psi_A + \alpha'\Psi_{A'}) = \alpha(\Psi_B, \Psi_A) + \alpha'(\Psi_B, \Psi_{A'}), \qquad (6.26)$$

где мы использовали суперпозицию состояний $|A\rangle$ и $|A'\rangle$ с произвольными комплексными коэффициентами α и α', и

(iii) положительная определённость скалярных квадратов (*норм*) всех векторов $|\Psi\rangle$ (все квадраты (Ψ, Ψ) вещественны, как следует из (6.25)),

$$(\Psi, \Psi) \geqslant 0, \qquad (6.27)$$

где равенство $(\Psi, \Psi) = 0$ имеет место лишь для *нулевого вектора*, который имеет все компоненты (скалярные произведения с любым базисным вектором и, таким образом, с любым другим вектором) равными нулю. Как следует из условий (i) и (ii), скалярное произведение *антилинейно* по отношению к *первому* вектору,

$$(\beta\Psi_B, \Psi_A) = (\Psi_A, \beta\Psi_B)^* = \Big(\beta(\Psi_A, \Psi_B)\Big)^* = \beta^*(\Psi_B, \Psi_A). \qquad (6.28)$$

Скалярное произведение (6.24), по предложению *П. Дирака*, называется *бракет*, где левый вектор — это *бра-вектор*, а правый — *кет-вектор.*

Фактически мы уже использовали конкретные реализации этого определения. В пространстве функций Ψ, *квадратично интегрируемых* в области их определения Γ, амплитуды вероятности (см. (3.14) и (3.31)) выражаются через интегралы с соответствующим элементом объёма $d\tau$,

$$(\Psi', \Psi) = \int_\Gamma d\tau\, \Psi'^*\Psi. \qquad (6.29)$$

В случае конечной размерности d вектор $|\Psi\rangle$ может быть представлен в виде *столбца*, построенного из d проекций (сравните с (6.17)),

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_d \end{pmatrix}, \quad a_j = (\Psi_j, \Psi), \quad j = 1, \dots, d. \tag{6.30}$$

В своём собственном представлении базисные векторы Ψ_j — это столбцы с только одной, j-ой, ненулевой компонентой (равной 1). Тогда бра-вектор представляет строку с комплексно-сопряжёнными компонентами, и мы будем также использовать *сопряжённый* вектор

$$\Psi^\dagger = \Big(a_1^*, \, a_2^*, \dots, a_d^*\Big), \tag{6.31}$$

так что скалярное произведение, использовавшееся в (6.30), определяется как

$$\langle \Psi_B | \Psi_A \rangle = \Psi_B^\dagger \Psi_A = \sum_{j=1}^{d} b_j^* a_j. \tag{6.32}$$

Мы предположили здесь, что базисные векторы *ортонормированы*,

$$\Psi_{j'}^\dagger \Psi_j = \delta_{j'j}, \tag{6.33}$$

хотя обобщение на случай неортогональных (но линейно-независимых) базисных векторов тривиально. Скалярное произведение (6.32) является частным случаем *умножения матриц* (строка × столбец). Легко видеть, что в обоих случаях (6.29) и (6.32) все аксиомы скалярного произведения выполняются.

Если нормы $|\Psi| \equiv \sqrt{(\Psi, \Psi)}$ интерпретируются как длины векторов, можно дополнить гильбертово пространство понятием расстояния:

$$|\Psi - \Psi'| = \sqrt{(\Psi - \Psi', \Psi - \Psi')} \tag{6.34}$$

и доказать все теоремы евклидовой геометрии для многомерных комплексных векторов. После этого можно рассматривать последовательности векторов, ввести понятия пределов, сходимости и т. д.

Задача 6.2

Докажите, что *неравенство треугольника*,

$$|\Psi - \Psi'| \leqslant |\Psi - \Psi''| + |\Psi'' - \Psi'|, \tag{6.35}$$

справедливо для любых трёх векторов Ψ, Ψ' и Ψ''.

Отождествляя амплитуды вероятности со скалярными произведениями соответствующих векторов в гильбертовом пространстве квантовых состояний системы, мы можем переписать принцип суперпозиции (6.13) в виде

$$(\Psi_B, \Psi_A) = \langle B|A\rangle = \sum_C (\Psi_C, \Psi_B)^*(\Psi_C, \Psi_A) \tag{6.36}$$

в полной аналогии с уравнениями (6.18) и (6.32). Например, возьмём в качестве состояния Ψ_B плоскую волну с импульсом $\mathbf{p}$ частицы, так что скалярное произведение $\langle B|A\rangle$ в (6.36) является волновой функцией $\Phi_A(\mathbf{p})$ состояния A в импульсном представлении (см. уравнение (6.21)). В качестве полного набора промежуточных состояний C можно взять множество локализованных состояний с определёнными значениями координаты $\mathbf{r}$, так что $\sum_C \to \int d^3r$ и, в соответствии с формулой (6.20), $(\Psi_C, \Psi_A) = \langle \mathbf{r}|A\rangle = \Psi_A(\mathbf{r})$ является координатой волновой функции состояния A. Тогда $\langle C|B\rangle$ является амплитудой вероятности нахождения координаты $\mathbf{r}$ в состоянии плоской волны, т. е. координатной волновой функции плоской волны:

$$(\Psi_C, \Psi_B) = \langle C|B\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}. \tag{6.37}$$

С учётом комплексного сопряжения в уравнении (6.36) мы приходим к стандартной форме преобразования Фурье (4.4):

$$\Phi_A(\mathbf{p}) = \int d^3r\, e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\Psi_A(\mathbf{r}). \tag{6.38}$$

Если взять в качестве набора промежуточных состояний C полный набор состояний $|A'\rangle$ со всеми возможными значениями A' тех же переменных, которые используются для идентификации исходного состояния $|A\rangle$, принцип суперпозиции примет форму

$$\langle B|A\rangle = \sum_{A'} \langle B|A'\rangle\langle A'|A\rangle. \tag{6.39}$$

Это равенство может быть выполнено в любом представлении B только в том случае, если амплитуда $\langle A'|A\rangle$ отбирает всего одну точку $A' = A$ во всей области интегрирования по A', т. е.

$$\langle A'|A\rangle = \delta(A', A), \tag{6.40}$$

где δ — символ Кронекера для дискретного спектра и дельта-функции Дирака для непрерывного спектра переменных A. Это означает, аналогично уравнению (6.33), что векторы состояния данного представления, но с различными значениями переменных должны быть *ортогональны*. В дискретном спектре вероятность можно нормировать,

$$P(A; A) = |\langle A|A\rangle|^2 = 1, \tag{6.41}$$

и тогда, используя свойство (iii) (6.27),

$$\langle A|A\rangle = 1. \tag{6.42}$$

Это совпадает с уравнением (6.40). С другой стороны, для $A' \neq A$ вероятность найти значение A' в состоянии $|A\rangle$ с $A \neq A'$ должна исчезать, что также следует из (6.40). Ненормируемые состояния непрерывного спектра могут рассматриваться с помощью предельного перехода. Напомним, что саму δ-функцию следует понимать именно таким образом (см. раздел 3.3).

При условии выполнения нормировки максимальный набор независимых промежуточных состояний $|C\rangle$ образует полный ортонормированный базис, который может быть использован для разложения (6.19) произвольного вектора состояния $|A\rangle$. Условие полноты набора $|C\rangle$, как видно из (6.19), формально можно записать в виде *разложения единицы*

$$\sum_C |C\rangle\langle C| = 1. \tag{6.43}$$

Это следует понимать как утверждение, что действие *оператора* в левой части (6.43) на любой вектор состояния полностью воспроизводит этот вектор — собираются *все проекции* исходного состояния. Если мы поместим уравнение (6.43) в обкладки между локализованными состояниями, то получим

$$\sum_C \langle \mathbf{r}'|C\rangle\langle C|\mathbf{r}\rangle = \langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \tag{6.44}$$

что является нашим старым условием полноты (3.16) в новых обозначениях. Если набор B полон, то полная вероятность всех возможных результатов измерения переменных B для данного (нормированного) состояния $|A\rangle$ в сумме даст 1,

$$\sum_B P(B;A) = \sum_B |\langle B|A\rangle|^2 = \sum_B \langle B|A\rangle^* \langle B|A\rangle = \sum_B \langle A|B\rangle\langle B|A\rangle = \\ = \langle A|A\rangle = 1. \tag{6.45}$$

Требование полноты, по существу, эквивалентно учёту вероятностей всех возможных процессов.

Подводя итог, мы постулируем, что для каждой квантовой системы можно ввести векторное пространство. Каждое возможное состояние системы является вектором в этом пространстве и может быть представлено в виде линейной комбинации базисных векторов, принадлежащих к полному набору независимых состояний. Наблюдаемые физические величины будут описывается линейными операторами, действующими в этом векторном пространстве. Строго говоря, мы можем работать с *лучами*, а не полными векторами, так как нормировка векторов состояния является произвольной.

6.5 Линейные операторы*

Линейный оператор $\hat{Q}$ — это правило, по которому преобразуется состояние из данного пространства в другое состояние в том же пространстве, причём преобразование линейно по отношению к произвольным комплексным коэффициентам суперпозиции, представляющей исходное состояние,

$$\hat{Q}(a\Psi_A + b\Psi_B) = a\hat{Q}\Psi_A + b\hat{Q}\Psi_B. \tag{6.46}$$

Проекция вектора на данное состояние (формула (6.26)) является примером линейного оператора. Если в результате действия оператора состояние $|\Psi\rangle$ не меняется, а только умножается на численный (в общем случае комплексный) множитель:

$$\hat{Q}|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle, \tag{6.47}$$

то это состояние является *собственным вектором* оператора $\hat{Q}$, соответствующим собственному (характеристическому) значению q. Совокупность собственных значений данного оператора образует его *спектр*. Собственный

вектор принадлежит к определённому собственному значению, хотя для данного собственного значения может существовать несколько линейно независимых собственных векторов. В этом случае собственное значение называется *вырожденным*. Все собственные векторы линейного оператора, которые принадлежат к одному и тому же в собственному значению, образуют *подпространство*, и любая линейная комбинация этих векторов также принадлежит этому подпространству. Размерность этого подпространства есть *степень (кратность) вырождения.*

Рассмотрим полный набор ортонормированных состояний $|n\rangle$. Как мы уже говорили, эти состояния удовлетворяют условиям (6.33) и (6.43),

$$\langle n|m\rangle = \delta(n,m), \tag{6.48}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1. \tag{6.49}$$

В правой части (6.49) фактически стоит *единичный оператор*, $\hat{1}$, действие которого на произвольное состояние тривиально,

$$\hat{1}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle. \tag{6.50}$$

Как правило, мы будем опускать «шляпку» у единичного оператора. Произвольный вектор может быть выражен в виде суперпозиции базисных векторов,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle, \tag{6.51}$$

где коэффициенты разложения (обобщенные Фурье-амплитуды) находятся из условия ортогональности (6.48),

$$c_n = \langle n|\Psi\rangle. \tag{6.52}$$

В силу свойства линейности (6.46) действие линейного оператора полностью определяется его действием на векторы базиса $|n\rangle$:

$$\hat{Q}|\Psi\rangle = \sum_n c_n\hat{Q}|n\rangle. \tag{6.53}$$

Вектор, получающийся при действии $\hat{Q}$ на базисный вектор $|n\rangle$, опять может быть представлен как комбинация базисных векторов $|m\rangle$ с некоторыми

коэффициентами Q_{mn},

$$\hat{Q}|n\rangle = \sum_m Q_{mn}|m\rangle. \tag{6.54}$$

Численные коэффициенты Q_{mn} образуют *матрицу* оператора $\hat{Q}$ *в данном базисе*, поэтому формулу (6.54) можно интерпретировать двумя способами: (i) как преобразование («вращение») базиса, когда повёрнутые векторы базиса разложены по векторам старого базиса, и (ii) как правило, по которому любому оператору в фиксированном базисе $|n\rangle$ сопоставляется соответствующая матрица. По аналогии с определением коэффициентов Фурье в уравнении (6.52) *матричные элементы* Q_{mn} могут быть определены путём умножения (6.54) на бра-вектор $\langle m|$,

$$Q_{mn} = \langle m|\hat{Q}|n\rangle. \tag{6.55}$$

В другом базисе матрица этого же оператора будет другой.

Произведение операторов, $\hat{S} = \hat{Q}\hat{R}$, является оператором, который есть результат последовательного действия оператора $\hat{R}$, а *затем* оператора $\hat{Q}$. Матричные элементы этого произведения операторов могут быть найдены как

$$S_{mn} = (QR)_{mn} = \langle m|\hat{Q}\hat{R}|n\rangle = \langle m|\hat{Q}\sum_l R_{ln}|l\rangle = \sum_l Q_{ml}R_{ln}, \tag{6.56}$$

т. е. матрица произведения операторов является обычной матрицей, получающейся в результате перемножения (строк на столбцы) матриц, соответствующих перемножаемым операторам. Конечно, необходимо соблюдать порядок операторов, поскольку операторы в общем случае *не коммутируют* и их *коммутаторы* (см. раздел 4.3) не обращаются в нуль. Результат (6.56) можно также записать, используя условия полноты (6.49) для промежуточного набора состояний $|l\rangle$. Единичный оператор можно вставлять внутрь любого операторного соотношения:

$$\langle m|\hat{Q}\hat{R}|n\rangle = \sum_l \langle m|\hat{Q}|l\rangle\langle l|\hat{R}|n\rangle = \sum_l Q_{ml}R_{ln}. \tag{6.57}$$

Операторные соотношения, в отличие от матричных, имеют универсальный вид, который не требует конкретизации базиса, поскольку они являются соотношениями между величинами, не зависящими от выбора системы координат.

6.6 Эрмитовы операторы*

Операторы, соответствующие физическим наблюдаемым величинам, должны обладать специальными свойствами. Проблема состоит в установлении связи (в общем случае комплексных) матричных элементов операторов с реальными результатами физических измерений.

Во-первых, определим для каждого линейного оператора $\hat{Q}$ *комплексно сопряжённый оператор* $\hat{Q}^*$, потребовав, чтобы в любом базисе матричные элементы двух операторов быть взаимно комплексно сопряженными,

$$\underline{\hat{Q}^*}: \quad (Q^*)_{mn} = (Q_{mn})^*. \tag{6.58}$$

Во-вторых, введём другой оператор, связанный с $\hat{Q}$, — *транспонированный* оператор $\hat{Q}^T$, который получается в результате перестановки строк и столбцов в матрице,

$$\underline{\hat{Q}^T}: \quad (\hat{Q}^T)_{mn} = Q_{nm}. \tag{6.59}$$

С помощью формулы (6.57) легко устанавливаются простые правила для произведения операторов:

$$(\hat{Q}\hat{R})^* = \hat{Q}^*\hat{R}^*, \tag{6.60}$$

$$(\hat{Q}\hat{R})^T = \hat{R}^T\hat{Q}^T. \tag{6.61}$$

Введём теперь путём объединения двух предыдущих свойств понятие *эрмитово сопряжённого* оператора $\hat{Q}^\dagger$. Для любого оператора $\hat{Q}$ его эрмитово сопряжённый оператор определяется таким образом, что для любых двух векторов $|\Psi\rangle$ и $|\Psi'\rangle$

$$(\hat{Q}\Psi, \Psi') = (\Psi, \hat{Q}^\dagger\Psi'), \tag{6.62}$$

т. е. его действие на кет-вектор даёт тот же результат, что действие $\hat{Q}$ на бра-вектор. Очевидно, что $(\hat{Q}^\dagger)^\dagger = \hat{Q}$. С учётом соотношения взаимности (6.25) мы находим, применяя (6.62) к базисным векторам,

$$(\Psi_m, \hat{Q}^\dagger\Psi_n) = (\hat{Q}\Psi_m, \Psi_n) = (\Psi_n, \hat{Q}\Psi_m)^* \quad \rightsquigarrow \quad (Q^\dagger)_{mn} = Q^*_{nm} \tag{6.63}$$

или, используя (6.58) и (6.59),

$$\hat{Q}^\dagger = (\hat{Q}^T)^* = (\hat{Q}^*)^T. \tag{6.64}$$

Из (6.60) и (6.61) для произведения операторов получаем

$$(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{Q}^\dagger. \tag{6.65}$$

Оператор $\hat{Q}$ является *эрмитовым (самосопряжённым)*, если он совпадает со своим эрмитово сопряжённым оператором, $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$. Матричные элементы эрмитова оператора удовлетворяют условию

$$Q_{mn} = Q^*_{nm}; \tag{6.66}$$

диагональные элементы матрицы Q_{nn} всегда вещественны, в то время как любой *недиагональный* матричный элемент комплексно сопряжён со своим зеркальным отражением относительно главной диагонали. Произведение двух эрмитовых операторов является эрмитовым, только если они коммутируют:

$$(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{Q}^\dagger = \hat{R}\hat{Q}, \tag{6.67}$$

что в общем случае не равно $\hat{Q}\hat{R}$. Тем не менее всегда можно построить две эрмитовых комбинации, *антикоммутатор*:

$$[\hat{Q}, \hat{R}]_+ \equiv \hat{Q}\hat{R} + \hat{R}\hat{Q} \tag{6.68}$$

и (с множителем i) коммутатор (4.26):

$$i[\hat{Q}, \hat{R}] \equiv i(\hat{Q}\hat{R} - \hat{R}\hat{Q}). \tag{6.69}$$

Задача 6.3

Покажите, что

а) для любого оператора $\hat{Q}$ оператор $\hat{Q} + \hat{Q}^\dagger$ эрмитов;

б) для любого эрмитова оператора $\hat{Q}$ и любых, не обязательно базисных, векторов $|\Psi\rangle$ и $|\Psi'\rangle$ справедлив аналог уравнения (6.66),

$$\langle\Psi'|\hat{Q}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{Q}|\Psi'\rangle^*; \tag{6.70}$$

в) для произвольного оператора $\hat{Q}$ оператор $\hat{Q}^\dagger\hat{Q}$ является эрмитовым, и для любого вектора состояния $|\Psi\rangle$ выполняется

$$\langle\Psi|\hat{Q}^\dagger\hat{Q}|\Psi\rangle \geqslant 0. \tag{6.71}$$

В главе 4 мы познакомились с операторами, соответствующими простейшим динамическим переменным: координатам, импульсам и моментам импульса. Свойство их эрмитовости зависит от класса функций, где они действуют, т. е. от гильбертова пространства. С некоторой осторожностью свойства эрмитовых операторов распространяются на пространства бесконечной размерности (мы не углубляемся в математические детали). Определим гильбертово пространство для одной частицы через координатное представление (координатные компоненты (6.20) вектора состояния). Скалярное произведение можно записать в виде интеграла (6.29) по бесконечному объёму или для конечного объема V, как в разделе 3.8. Если мы используем бесконечный объём и хотим, чтобы интеграл сходился, то ограничиваемся *квадратично интегрируемыми* функциями. Локализованное состояние (4.41) не принадлежит к этому классу, хотя мы считаем дельта-функцию *пределом* «хороших» функций, которые принадлежат пространству Гильберта. Фурье-преобразование квадратично интегрируемой функции координат даёт квадратично интегрируемую функцию в импульсном представлении, где скалярное произведение может быть определено полностью аналогично. Для конечного объёма мы должны указать граничные условия, которые определяют класс функций. Например, функции, аналогичные плоским волнам, можно рассматривать с нулевыми или периодическими граничными условиями на поверхности. Также может быть удобным добавить регуляризующий множитель $e^{-\eta|x|}$ с пределом $\eta \to +0$, что делает функции квадратично интегрируемыми.

Задача 6.4

а) Покажите в координатном и импульсном представлениях, что оператор $\hat{x}$ эрмитов на классе квадратично интегрируемых функций.

б) То же для оператора $\hat{p}$.

Задача 6.5

Покажите, что оператор (4.68) орбитального момента относительно определённой оси эрмитов на классе *периодических* функций угла φ с периодом 2π.

6.7 Свойства эрмитовых операторов*

Собственные значения (6.47) и соответствующие собственные функции эрмитовых операторов играют исключительно важную роль в квантовой теории. Для операторов координаты и импульса мы обсуждали их собственные значения и собственные состояния в разделе 4.4. Считалось само собой разумеющимся, что, в соответствии с их физическим смыслом, собственные

значения — действительные числа. На самом деле это свойство выделяет эрмитовы операторы среди всех возможных линейных операторов.

Вернёмся к уравнению (6.47), которое определяет собственный вектор $|\Psi\rangle$ и собственное значение q оператора $\hat{Q}$. Рассмотрим два вектора, $|\Psi_q\rangle$ и $|\Psi_{q'}\rangle$, с собственными значениями q и q' одного и того же оператора $\hat{Q}$:

$$\hat{Q}|\Psi_q\rangle = q|\Psi_q\rangle, \quad \hat{Q}|\Psi_{q'}\rangle = q'|\Psi_{q'}\rangle. \tag{6.72}$$

Умножим второе уравнение на бра-вектор $\langle\Psi_q|$ и сделаем комплексное сопряжение:

$$\langle\Psi_q|\hat{Q}|\Psi_{q'}\rangle^* = q'^*\langle\Psi_q|\Psi_{q'}\rangle^*. \tag{6.73}$$

Для эрмитова оператора $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ и с использованием первого уравнения (6.72) левую часть (6.73) можно переписать в виде

$$\langle\Psi_q|\hat{Q}|\Psi_{q'}\rangle^* = \langle\Psi_{q'}|\hat{Q}^\dagger|\Psi_q\rangle = \langle\Psi_{q'}|\hat{Q}|\Psi_q\rangle = q\langle\Psi_{q'}|\Psi_q\rangle. \tag{6.74}$$

Скалярное произведение в правой части уравнения (6.74) такое же, как в формуле (6.73), и, взяв разность (6.73) и (6.74), получим

$$(q'^* - q)\langle\Psi_{q'}|\Psi_q\rangle = 0. \tag{6.75}$$

Если $|\Psi_{q'}\rangle$ — тот же (ненулевой) вектор, как $|\Psi_q\rangle$, $q' = q$, то его норма положительна (уравнение (6.27)) и из (6.75) следует, что $q^* = q$. Это показывает, что *все собственные значения эрмитовых операторов являются вещественными числами.* Если собственные значения разные, $q' \neq q$, то мы приходим к выражению

$$\langle\Psi_q|\Psi_{q'}\rangle = 0, \quad \text{если} \quad q \neq q', \tag{6.76}$$

т. е. *собственные векторы эрмитова оператора, принадлежащие к различным собственным значениям, ортогональны.*

Задача 6.6

Найдите спектр собственных значений для оператора $\hat{A} = \zeta\hat{x} + \hat{p}$, где ζ — произвольное комплексное число нужной размерности (оба слагаемых в $\hat{A}$ должны иметь одинаковую физическую размерность). Найдите соответствующие собственные функции в координатном и импульсном представлениях. При каких условиях эти собственные функции физически допустимы?

Решение.

Собственные функции в координатном представлении имеют вид

$$\psi_A(x) = e^{-(i/\hbar)[(\zeta/2)x^2 - Ax]}, \tag{6.77}$$

где A — собственное значение оператора $\hat{A}$ и мы использовали $\hat{x} = x$, $\hat{p} = -i\hbar d/dx$. Функция (6.77) может описывать физическое состояние частицы, если плотность вероятности

$$|\psi_A|^2 = e^{[(\mathrm{Im}\,\zeta)x^2 - 2(\mathrm{Im}A)x]/\hbar} \tag{6.78}$$

не растёт неограниченно при больших $|x|$. Для этого требуется, чтобы $\mathrm{Im}(\zeta) < 0$. Если ζ — вещественное число, то оператор $\hat{A}$ эрмитов. Тогда, согласно (6.78), очевидно требуется, чтобы собственные значения A были вещественными, в противном случае $|\psi_A|^2$ будет бесконечно расти на одной стороне. Такие же результаты следуют из импульсного представления.

Одной из возможных ситуаций, которую мы ещё не обсуждали, является случай, когда собственное значение q *вырождено*. Любая суперпозиция соответствующих собственных векторов является также собственным состоянием с тем же собственным значением, т. е. они образуют *подпространство* из нескольких линейно независимых собственных векторов. Из нашего предыдущего рассмотрения нельзя сделать вывод, что эти собственные векторы ортогональны. Тем не менее мы всегда можем найти максимальный набор взаимно ортогональных векторов, которые могут быть взяты в качестве базиса в этом подпространстве. Для этой цели служит стандартная процедура *ортогонализации*, известная из линейной алгебры. Если максимальное число линейно независимых векторов $|\Psi_j\rangle$ с одним и тем же собственным значением эрмитового оператора $\hat{Q}$ равно d, это число даёт *размерность* подпространства. Возьмём один из исходных векторов $|1\rangle \equiv |\Psi_1\rangle$, нормируем его $\langle 1|1\rangle = 1$ и построим линейную комбинацию $|2\rangle = |\Psi_2\rangle + \alpha|1\rangle$, где $|\Psi_2\rangle$ — какой-либо из $(d-1)$ остальных векторов. Коэффициент α может быть определен таким образом, чтобы выполнялось

$$\langle 1|2\rangle = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \alpha = -\langle 1|\Psi_2\rangle, \quad |2\rangle = |\Psi_2\rangle - \langle 1|\Psi_2\rangle|1\rangle, \tag{6.79}$$

т. е. мы вычитаем часть второго вектора, которая не ортогональна первому вектору (см. рис. 6.3). Нормировав $|2\rangle$ и продолжая таким же образом, мы построим d ортогональных векторов — новый базис в этом вырожденном подпространстве.

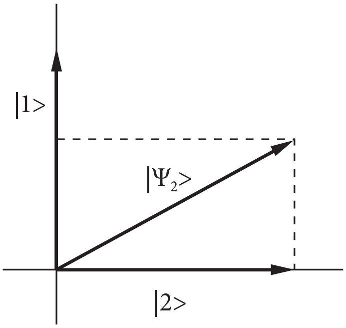

Рис. 6.3: Иллюстрация процесса ортогонализации

6.8 Диагонализация⋆

Теперь мы можем обсудить практический алгоритм нахождения собственных значений и собственных векторов данного эрмитового оператора в пространстве *конечной размерности*. Мы ищем решение задачи на *собственные значения*:

$$\hat{Q}|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle, \tag{6.80}$$

где и набор собственных векторов $\{|\Psi\rangle\}$, и спектр $\{q\}$ оператора неизвестны. Задача решается алгебраически с использованием любого ортонормированного базиса $|n\rangle$, $n = 1, ..., d$, для разложения неизвестных собственных векторов:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{d} c_n |n\rangle. \tag{6.81}$$

Подставив (6.81) в уравнение (6.80), получаем

$$\sum_n c_n \hat{Q}|n\rangle = q \sum_n c_n |n\rangle. \tag{6.82}$$

Проекция (6.82) на произвольный базисный бра-вектор $\langle m|$ при использовании ортонормированности базисных состояний (6.48) и матричных элементов (6.55) даёт:

$$\sum_n c_n (Q_{mn} - q\delta_{mn}) = 0, \quad m = 1, \ldots, d. \tag{6.83}$$

Мы пришли к однородной системе d линейных алгебраических уравнений для амплитуд $\{c_n\}$ собственного вектора в данном базисе. Тривиальное решение, когда все $c_n = 0$, всегда существует. Нетривиальные решения существуют, если определитель матрицы коэффициентов в уравнении (6.82) равен нулю,

$$\mathrm{Det}(\hat{Q} - q\hat{1}) = 0, \tag{6.84}$$

где $\hat{1}$ — единичный оператор (6.50) с матричными элементами δ_{mn} в любом ортонормированном базисе. Уравнение (6.84) называется *характеристическим* или *секулярным* и сводится к полиному $P(q)$ d-ой степени, который имеет d корней $q_\alpha,\ \alpha = 1, 2, \dots, d,$, являющихся собственными значениями, которые мы ищем. Для эрмитового оператора все собственные значения q_α вещественны. Для каждого собственного значения q_α, возвращаясь к системе уравнений (6.83), находим $d-1$ амплитуд, выраженных через последнюю амплитуду, которую можно определить, использовав условие нормировки:

$$\langle \Psi^{(\alpha)} | \Psi^{(\alpha)} \rangle = \sum_n |c_n^{(\alpha)}|^2 = 1. \tag{6.85}$$

Так как собственные векторы для различных собственных значений ортогональны, а для вырожденных собственных значений они могут быть ортогонализированы, в результате этой процедуры получается набор d ортогональных векторов в d-мерном пространстве, который может служить в качестве нового базиса. В этом базисе оператор $\hat{Q}$ является *диагональным* с собственными значениями q_α на главной диагонали,

$$\langle \Psi^{(\alpha)} | \hat{Q} | \Psi^{(\beta)} \rangle = q_\alpha \delta_{\alpha\beta}. \tag{6.86}$$

Если мы определим, как и в (4.17), *среднее* значение оператора в произвольном состоянии как значение его диагонального матричного элемента для этого состояния, то это среднее значение совпадает с собственным значением. Переход от произвольного исходного базиса $|n\rangle$ к базису $|\Psi^{(\alpha)}\rangle$, построенному из собственных векторов некоторого оператора, называется *диагонализацией.* Примеры с важными физическими следствиями будут отложены до главы 10.

Задача 6.7

Покажите, что любой оператор $\hat{Q}$, который имеет конечный полный набор собственных значений q_α, $\alpha = 1, \dots, d$, удовлетворяет полиномиальному

операторному уравнению

$$P_d(\hat{Q}) \equiv (\hat{Q} - q_1)(\hat{Q} - q_2)...(\hat{Q} - q_d) = 0. \tag{6.87}$$

Уравнение (6.87) следует понимать как утверждение, что оператор в левой части уравнения уничтожает любой вектор в гильбертовом пространстве. Из этого результата следует, что любая регулярная функции эрмитова оператора в d-мерном пространстве может быть выражена как операторный полином степени не выше чем $d - 1$.

6.9 Преобразования базиса*

Мы обсудили переход от произвольного базиса к базису собственных векторов эрмитова оператора. Оба набора являются полными и ортонормированными. Существует бесконечное количество возможностей для выбора базиса, что аналогично вращениям базисных векторов в координатном пространстве. Все такие преобразования обладают общими свойствами, которые приведены в этом разделе.

Мы помним, что оператор полностью определяется своим действием на векторы базиса. Выстроив базисные вектора в некотором порядке, рассмотрим преобразование $\hat{U}$, которое даёт новый вектор $|n\rangle'$ вместо вектора прежнего базиса $|n\rangle$,

$$\hat{U}|n\rangle = |n\rangle'. \tag{6.88}$$

Пусть новый вектор имеет представление в прежнем базисе в виде

$$|n\rangle' = \sum_m C^n_m |m\rangle. \tag{6.89}$$

Набор коэффициентов C^n_m определяет волновую функцию состояния $|n\rangle'$ в старом представлении и в то же время матричные элементы $\hat{U}$ в прежнем базисе,

$$U_{mn} = \langle m|\hat{U}|n\rangle = \langle m|n\rangle' = C^n_m. \tag{6.90}$$

Таким образом, новая волновая функция $|n\rangle'$ в старом представлении просто является n-м столбцом матрицы преобразования U_{mn}.

Если преобразование $\hat{U}$ является *несингулярным* (не превращает ни один ненулевой старый вектор в нулевой), *обратное* преобразование U^{-1} от

нового базиса к старому тоже существует,

$$\hat{U}^{-1}|n\rangle' = |n\rangle, \quad \hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = \hat{1}. \tag{6.91}$$

Если нуль принадлежит спектру оператора $\hat{Q}$, то существует ненулевой вектор $|\Psi\rangle$ такой, что $\hat{Q}|\Psi\rangle = 0$, так что оператор $\hat{Q}$ является сингулярным и обратный ему оператор не существует. Для несингулярных операторов $\hat{Q}$ и $\hat{R}$

$$(\hat{Q}\hat{R})^{-1} = \hat{R}^{-1}\hat{Q}^{-1}. \tag{6.92}$$

Если оба базисных набора, $|n\rangle'$ и $|n\rangle$, ортонормированы, то

$$'\langle m|n\rangle' = \delta_{mn} = \langle m|n\rangle. \tag{6.93}$$

Это преобразование обладает особыми свойствами. Из уравнения (6.88) и его эрмитово сопряжённого $'\langle m| = \langle m|\hat{U}^\dagger$ следует, что

$$'\langle m|n\rangle' = \langle m|\hat{U}^\dagger\hat{U}|n\rangle, \tag{6.94}$$

так что эквивалентность (6.93) для *любой* пары базисных векторов имеет место, если оператор, выполняющий преобразование между двумя ортонормированными базисами, удовлетворяет условию

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1} \quad \rightsquigarrow \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \tag{6.95}$$

Такие преобразования называются *унитарными*. Произведение (последовательное действие) двух унитарных операторов, $\hat{U}$ и $\hat{V}$, является также унитарным оператором:

$$(\hat{U}\hat{V})^\dagger = \hat{V}^\dagger\hat{U}^\dagger = \hat{V}^{-1}\hat{U}^{-1} = (\hat{U}\hat{V})^{-1}. \tag{6.96}$$

Единичный оператор $\hat{1}$, очевидно, является унитарным. Таким образом, все свойства группы (см. раздел 4.6) выполняются и унитарные операторы, действующие в пространстве данной конечной размерности d, образуют *унитарную группу* $\mathcal{U}(d)$.

Унитарное преобразование сохраняет все физические амплитуды, выражаемые в виде перекрытия двух векторов состояния. Действительно, произвольное состояние $|\Psi\rangle$ при таком преобразовании $\hat{U}$ трансформируется в $|\Psi'\rangle$, и новый вектор имеет в новом базисе те же амплитуды, что и

старый вектор в старом базисе,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \quad \rightsquigarrow \quad \hat{U}|\Psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle' = |\Psi'\rangle. \tag{6.97}$$

Отсюда следует

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle \to \langle\Psi_1'|\Psi_2'\rangle = \langle\hat{U}\Psi_1|\hat{U}\Psi_2\rangle = \langle\Psi_1|\hat{U}^\dagger\hat{U}\Psi_2\rangle = \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle. \tag{6.98}$$

Операторные соотношения между векторами состояния в общем случае меняются в различных представлениях. Пусть два исходных вектора $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ связаны через оператор $\hat{Q}$,

$$|\Psi_2\rangle = \hat{Q}|\Psi_1\rangle. \tag{6.99}$$

Применим несингулярное преобразование $\hat{T}$ к обеим частям:

$$|\Psi_2\rangle' = \hat{T}|\Psi_2\rangle = \hat{T}\hat{Q}|\Psi_1\rangle = \hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1}\hat{T}|\Psi_1\rangle = \hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1}|\Psi_1\rangle'. \tag{6.100}$$

Это означает, что после преобразования $\hat{T}$ роль оператора $\hat{Q}$ будет играть *преобразованный оператор*

$$\hat{Q}' = \hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1} \tag{6.101}$$

(*преобразование подобия*). Мы можем найти условия, при которых эрмитов оператор $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ остаётся эрмитовым, $\hat{Q}' = \hat{Q}'^\dagger$. Последнее равенство приводит к

$$\hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1} = (\hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1})^\dagger = (\hat{T}^{-1})^\dagger\hat{Q}^\dagger\hat{T}^\dagger. \tag{6.102}$$

Легко показать, что

$$(\hat{T}^{-1})^\dagger = (\hat{T}^\dagger)^{-1}. \tag{6.103}$$

Поэтому эрмитовость $\hat{Q}$ сохраняется, если

$$(\hat{T}^\dagger)^{-1}\hat{Q}\hat{T}^\dagger = \hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1}, \tag{6.104}$$

и, умножая обе части последнего равенства на $\hat{T}^\dagger$ слева и на $\hat{T}$ справа, мы приходим к

$$\hat{Q}\hat{T}^\dagger\hat{T} = \hat{T}^\dagger\hat{T}\hat{Q}, \tag{6.105}$$

т. е. оператор $\hat{T}^\dagger \hat{T}$ должен коммутировать с произвольным эрмитовым оператором. Тогда, согласно задаче 6.8, $\hat{T}^\dagger \hat{T} = \text{const} \cdot \hat{1}$. Таким образом, *унитарные* преобразования $\hat{U}$ сохраняют эрмитовость операторов; в новом базисе оператор

$$\hat{Q}' = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^\dagger \tag{6.106}$$

имеет точно такие же матричные элементы, как и прежде,

$$Q'_{m'n'} = Q_{mn}. \tag{6.107}$$

Задача 6.8

Докажите, что оператор в векторном пространстве конечной размерности, коммутирующий с любым другим линейным оператором, является константой, умноженной на единичный оператор.

Решение.

Так как $[\hat{X}, \hat{A}] = 0$ для произвольного оператора $\hat{A}$, мы можем взять $\hat{A}$ только с одним ненулевым матричным элементом A_{kl}, так что $A_{mn} = \delta_{mk}\delta_{nl}$. Тогда для любых i, j должно быть

$$[\hat{X}, \hat{A}]_{ij} = \sum_n (X_{in}A_{nj} - A_{in}X_{nj}) = X_{ik}\delta_{lj} - \delta_{ik}X_{lj} = 0. \tag{6.108}$$

Единственным решением является $X_{ik} = c\delta_{ik}$, или $\hat{X} = c \cdot \hat{1}$. Доказательство можно повторить для оператора $\hat{A}$, являющегося произвольным *эрмитовым* оператором (число независимых эрмитовых операторов равно d^2, как и общее число независимых операторов).

6.10 Непрерывные преобразования и генераторы*

Собственные значения унитарного оператора $\hat{U}$ являются комплексными числами u с абсолютным значением, равным единице: если

$$\hat{U}|\Psi\rangle = u|\Psi\rangle, \tag{6.109}$$

то находим для $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{U}^\dagger \hat{U}|\Psi\rangle = |u|^2\langle\Psi|\Psi\rangle, \tag{6.110}$$

таким образом,

$$|u|^2 = 1, \quad u = e^{i\gamma} \tag{6.111}$$

с вещественным параметром γ. Мы можем диагонализовать унитарный оператор с помощью стандартной процедуры и найти все его собственные значения $\exp(i\gamma_n)$, которые расположены на окружности единичного радиуса в комплексной плоскости. Если ввести *эрмитов* оператор $\hat{G}$ с собственными значениями γ_n, мы получим операторное тождество

$$\hat{U} = e^{i\hat{G}}, \tag{6.112}$$

которое действительно в произвольном базисе. Функцию от оператора в уравнении (6.112) следует понимать как соответствующий степенной ряд.

Важный вывод состоит в том, что любой унитарный оператор может быть представлен в виде (6.112) с эрмитовым оператором $\hat{G}$. Во многих случаях унитарные преобразования $\hat{U}(\alpha)$ зависят от *непрерывного* вещественного параметра α (или от нескольких параметров) и образуют *группу преобразований*. Каждое преобразование $\hat{U}(\alpha)$ имеет обратное $\left(\hat{U}(\alpha)\right)^{-1}$, а единичное преобразование, $\hat{U}(\alpha_0) = \hat{1}$, изменением масштаба α может быть приведено к начальному значению, $\alpha_0 = 0$. Вблизи α_0 параметр α мал и в линейном приближении $\hat{G}(\alpha) \approx \alpha\hat{g}$. При преобразовании $\hat{U}(\alpha)$, которое близко к единичному оператору (*инфинитезимальное* преобразование),

$$\hat{U}(\alpha) \approx \hat{1} + i\alpha\hat{g}. \tag{6.113}$$

Тогда эрмитов оператор $\hat{g}$ является *генератором* преобразования (см. разделы 4.5 и 4.7), и обратное преобразование с той же точностью есть

$$\hat{U}^{-1}(\alpha) = \hat{U}^{\dagger}(\alpha) \approx \hat{1} - i\alpha\hat{g}. \tag{6.114}$$

Общее правило операторного преобразования (6.106) может быть применено к бесконечно малым преобразованиям, когда

$$\delta|\Psi\rangle = \hat{U}|\Psi\rangle - |\Psi\rangle = i\alpha\hat{g}|\Psi\rangle \tag{6.115}$$

и

$$\delta\hat{Q} = \hat{Q}' - \hat{Q} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^{-1} - \hat{Q}. \tag{6.116}$$

С помощью операторов, преобразованных в линеаризованный вид (6.113), (6.114), находим

$$\delta\hat{Q} = (1 + i\alpha\hat{g})\hat{Q}(1 - i\alpha\hat{g}) - \hat{Q} \approx i\alpha(\hat{g}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{g}) = i\alpha[\hat{g}, \hat{Q}], \tag{6.117}$$

так что преобразование операторов определяется в линейном приближении их *коммутаторами с генераторами* преобразований.

В главе 4 мы уже рассматривали преобразования пространственного сдвига и поворота. Оба они являются унитарными, как это ясно из их физического смысла: перекрытия волновых функций не изменятся, если обе функции одинаково сдвигаются в пространстве или поворачиваются на один и тот же угол. В обоих случаях мы нашли экспоненциальное представление (6.112) с непрерывными параметрами и соответствующими эрмитовыми генераторами, операторами импульса и орбитального момента. Результаты задач 4.7 и 4.8 показывают, что при *сдвиге* на вектор a операторы координаты и импульса преобразуются как

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{a}, \quad \hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}}. \tag{6.118}$$

Компоненты любого *векторного* оператора $\hat{\mathbf{V}}$ изменяются при вращениях на угол α вокруг оси z согласно

$$\hat{V}'_x = \hat{V}_x \cos\alpha + \hat{V}_y \sin\alpha, \quad \hat{V}'_y = \hat{V}_y \cos\alpha - \hat{V}_x \sin\alpha, \quad \hat{V}'_z = \hat{V}_z. \tag{6.119}$$

Заметим, что в (6.119) мы получили обычное преобразование для вращения объекта на угол $-\alpha$ в полной аналогии с преобразованием координат при перемещении (6.118). Это связано с разницей между *активной* картиной преобразования (преобразуется объект) и *пассивной* картиной, когда система координат преобразуется в обратном направлении.

6.11 Проекционные операторы*

Для того чтобы явно применить полный операторный формализм к конкретным квантовым переменным, мы должны сначала ввести класс *проекционных операторов*. Мы можем разделить пространство Гильберта с полным базисом $|n\rangle$ на две части: подпространство Γ, натянутое на часть $\{n\} \in \Gamma$ базисных векторов, и его ортогональное дополнение $\bar{\Gamma}$. Любой

вектор $|\Psi\rangle$ однозначно представляется в виде суперпозиции:

$$|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_\Gamma + |\Psi\rangle_{\bar\Gamma}, \quad |\Psi\rangle_\Gamma = \sum_{n\in\Gamma} |n\rangle\langle n|\Psi\rangle. \tag{6.120}$$

Проекционный оператор (*проектор*) $\hat\Lambda_\Gamma$ — это оператор, отсекающий часть произвольного вектора, которая не принадлежат множеству Γ,

$$\hat\Lambda_\Gamma|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_\Gamma. \tag{6.121}$$

Очевидно, что

$$\hat\Lambda_\Gamma + \hat\Lambda_{\bar\Gamma} = \hat{1}. \tag{6.122}$$

Проекционный оператор можно формально записать в виде

$$\hat\Lambda_\Gamma = \sum_{n\in\Gamma} |n\rangle\langle n|; \tag{6.123}$$

оператор

$$\hat\Lambda_n = |n\rangle\langle n| \tag{6.124}$$

проектирует n-ю компоненту вектора. Если Γ совпадает со всем пространством, то $\hat\Lambda_\Gamma = \hat{1}$. В этом случае $\bar\Gamma$ является пустым множеством, а уравнение (6.123) — это наше старое условие (6.43) и (6.49) полноты базиса. Иногда бывает удобно представить произвольный оператор $\hat Q$ с матричными элементами Q_{mn} в определённом базисе в виде

$$\hat Q = \sum_{mn} Q_{mn}|m\rangle\langle n|. \tag{6.125}$$

Матричный элемент Q_{mn} соответствует *переходу* $n \to m$, так как мы извлекаем n-ю компоненту вектора и перенаправляем её вдоль направления m.

Любая степень проекционного оператора равна ему самому,

$$(\hat\Lambda_\Gamma)^k = \hat\Lambda_\Gamma, \tag{6.126}$$

так как Γ-проекция вектора уже полностью лежит в подпространстве Γ, и поэтому следующие проекции не изменяют результат. Отсюда следует, что собственные значения проекционного оператора Λ_Γ либо 1 (любой вектор

$|\Psi\rangle_\Gamma$ является таким собственным вектором), либо 0 (любой вектор $|\Psi\rangle_{\bar{\Gamma}}$ — такой собственный вектор). Таким образом, проекционный оператор является сингулярным и не имеет обратного оператора: невозможно однозначно восстановить весь исходный вектор после того, как некоторых компоненты были уничтожены при проектировании.

Задача 6.9

Покажите, что проекционные операторы являются линейными и эрмитовыми.

Задача 6.10

Установите условия, при которых операторы суммы $\Lambda_\Gamma + \Lambda_{\Gamma'}$, разности $\Lambda_\Gamma - \Lambda_{\Gamma'}$ и произведения $\Lambda_\Gamma \Lambda_{\Gamma'}$ двух проекционных операторов Λ_Γ и $\Lambda_{\Gamma'}$ являются снова проекционными операторами. На какие многообразия они проектируют?

Задача 6.11

Для оператора $\hat{Q}$ с множеством $\{q_n\}$ собственных значений постройте проекционный оператор $\hat{\Lambda}_k$ такой, что он проектирует компоненты на невырожденной базисный вектор $|k\rangle$.

Решение.

$$\hat{\Lambda}_k = \prod_{n(\neq k)} \frac{\hat{Q} - q_n}{q_k - q_n}. \tag{6.127}$$

6.12 Операторы наблюдаемых

Теперь мы в состоянии построить оператор, который будет символизировать процедуру измерения динамической переменной A. Пусть состояние $|a\rangle$ имеет определённое значение a этой переменной (в то же время оно может быть охарактеризовано определёнными значениями других величин). Пусть $\Lambda(a')$ — оператор проектирования на подпространство состояний, где A имеет данное значение a',

$$\hat{\Lambda}(a')|a\rangle = |a\rangle\delta(a', a), \tag{6.128}$$

проекция вектора $|a\rangle$ является полным вектором, если a совпадает с требуемым значением a', и эта проекция исчезает, если $a \neq a'$. *Оператор* $\hat{A}$

для динамической переменной A мы определяем как сумму проекционных операторов (6.127) по всем возможным значениям a' этой переменной (весь спектр A), умноженной на соответствующее значение этой величины,

$$\hat{A} = \sum_{a'} a' \hat{\Lambda}(a') = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'|. \tag{6.129}$$

Задача 6.12

В соответствии с общим определением (6.129) операторы координаты и импульса могут быть выражены как

$$\hat{x} = \int dx\, x\, |x\rangle\langle x|, \quad \hat{p} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, p\, |p\rangle\langle p|, \tag{6.130}$$

где локализованные состояния $|x\rangle$ и состояния плоской волны $|p\rangle$ мы используем как полные наборы, и нормировка в импульсном пространстве выбирается согласно (4.2). Докажите, что эти выражения определяют стандартный коммутатор (4.28).

Решение.

С использованием координатной волновой функции $\langle x|p\rangle = \exp[(i/\hbar)px]$ плоской волны коммутатор операторов (6.130) равен

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \int dx \frac{dp}{2\pi\hbar}\, xp \left\{ e^{(i/\hbar)px} |x\rangle\langle p| - e^{-(i/\hbar)px} |p\rangle\langle x| \right\}. \tag{6.131}$$

Преобразуя состояния $|p\rangle$ в координатное представление и интегрируя затем по p, получаем

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= \int dx\, dy \frac{dp}{2\pi\hbar}\, p e^{(i/\hbar)p(x-y)} |x\rangle\langle y| (x-y) = \\ &= \int dx\, dy |x\rangle\langle y| (x-y)\, i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\, \delta(x-y). \end{aligned} \tag{6.132}$$

Тогда матричный элемент коммутатора между произвольными состояниями выражается как

$$\langle n|[\hat{x}, \hat{p}]|m\rangle = \int dx\, dy\, \psi_n^*(x) \psi_m(y) (x-y) i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\, \delta(x-y). \tag{6.133}$$

Интегрируя сначала по x с использованием дельта-функции, мы приходим к выражению

$$\begin{aligned}\langle n|[\hat{x},\hat{p}]|m\rangle = i\hbar\int dy\,\psi_m(y)\left[\frac{\partial}{\partial y}\Big(y\psi_n^*(y)\Big) - y\frac{\partial\psi_n^*}{\partial y}\right] = \\ = i\hbar\int dy\psi_n^*(y)\psi_m(y),\end{aligned} \tag{6.134}$$

что доказывает $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$.

С учётом определения (6.129) результат действия оператора $\hat{A}$ на состояние $|a\rangle$ с определённым значением a переменной A сводится к умножению состояния на эту величину,

$$\hat{A}|a\rangle = \sum_{a'} a'\hat{\Lambda}(a')|a\rangle = \sum_{a'} a'\delta(a,a')|a\rangle = a|a\rangle. \tag{6.135}$$

Таким образом, если переменная A имеет в данном состоянии определённое значение a, это состояние является *собственным* состоянием оператора $\hat{A}$ с собственным значением, как раз равным a. В результате измерения A можно получить любое возможное значение a и только одно из этих значений. Таким образом, каждый возможный экспериментальный результат является *собственным значением* $\hat{A}$ и, наоборот, любое собственное значение может в некоторых ситуациях появляться в результате измерения. Спектр оператора, отвечающего данной наблюдаемой, предопределяет все возможные результаты её измерений.

Теперь легко найти, как оператор $\hat{A}$ действует на произвольное состояние $|\Psi\rangle$, а не на состояние с определённым значением A. В общем случае переменная A не имеет определённого значения в состоянии $|\Psi\rangle$. Тем не менее множество состояний $|a\rangle$, охватывающее все возможные собственные векторы $\hat{A}$, является полным, и мы можем разложить $|\Psi\rangle$, используя этот набор в качестве базиса,

$$|\Psi\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\Psi\rangle. \tag{6.136}$$

Оператор $\hat{A}$ (см. уравнения (6.129) и (6.128)) действует как

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_a \hat{A}|a\rangle\langle a|\Psi\rangle = \sum_a a|a\rangle\langle a|\Psi\rangle. \tag{6.137}$$

Пусть имеется много одинаковых систем, приготовленных в состоянии $|\Psi\rangle$. При измерении переменной A каждое испытание даёт определённый результат — одно из собственных значений a. Среднее значение при большом числе измерений является *ожидаемым значением* $\langle A\rangle_\Psi$. Согласно определению вероятности $P(a;\Psi)$ различных значений A среднее значение равно

$$\langle A\rangle_\Psi = \sum_a aP(a;\Psi). \tag{6.138}$$

Вероятность равна квадрату амплитуды $\langle a|\Psi\rangle$,

$$\langle A\rangle_\Psi = \sum_a a|\langle a|\Psi\rangle|^2, \tag{6.139}$$

или, используя свойства взаимности (6.25) и линейности (6.26),

$$\langle A\rangle_\Psi = \sum_a a\langle a|\Psi\rangle^*\langle a|\Psi\rangle = \sum_a a\langle\Psi|a\rangle\langle a|\Psi\rangle = \langle\Psi\sum_a a|a\rangle\langle a|\Psi\rangle. \tag{6.140}$$

Сравнивая (6.140) с (6.137), мы получаем, что среднее значение переменной A в состоянии $|\Psi\rangle$ даётся диагональным матричным элементом оператора $\hat{A}$,

$$\langle A\rangle_\Psi = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle \equiv (\Psi, \hat{A}\Psi), \tag{6.141}$$

как мы видели и ранее (см. (4.17)). Поскольку все результаты измерений, а также их средние значения являются вещественными, операторы наблюдаемых должны быть *эрмитовыми*. Отметим также, что для нормированного собственного состояния $|a\rangle$, где A имеет определённое значение a, среднее значение должно совпадать с этим собственным значением,

$$\langle A\rangle_a = a. \tag{6.142}$$

Среднее значение само по себе не может полностью описывать распределение экспериментальных результатов. Следующей важной характеристикой состояния $|\Psi\rangle$ является среднеквадратичное отклонение измерений от среднего значения $\langle A\rangle_\Psi$ — то, что в главе 5 мы называли *неопределённостью*,

$(\Delta A)_\Psi$. Теперь мы можем сформулировать это понятие более точно:

$$\begin{aligned}(\Delta A)_\Psi &= \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle_\Psi)^2\rangle_\Psi} = \\ &= \sqrt{\langle A^2 - 2A\langle A\rangle_\Psi + \langle A\rangle_\Psi^2\rangle_\Psi} = \sqrt{\langle A^2\rangle_\Psi - \langle A\rangle_\Psi^2}.\end{aligned} \tag{6.143}$$

Неопределённость $(\Delta A)_\Psi$ исчезает тогда и только тогда, когда состояние $|\Psi\rangle$ является собственным состоянием оператора $\hat{A}$. В противном случае результат измерения A не может быть предсказан однозначно и квантовая теория даёт только вероятности различных результатов.

6.13 Одновременная измеримость

Мы постулировали, что каждой динамической переменной A может быть поставлен в соответствие эрмитов оператор $\hat{A}$, действующий в гильбертовом пространстве системы. Набор собственных векторов $|a\rangle$ оператора $\hat{A}$ является полным и ортонормированным. Однако полная характеристика состояния требует знания максимального набора величин, которые могут одновременно иметь определённые значения. Величины A и B *одновременно измеримы* в состоянии $|\Psi\rangle$, если измерение каждой из них даёт однозначный результат. Тогда состояние $|\Psi\rangle$ должно быть собственным состоянием обоих операторов, $\hat{A}$ и $\hat{B}$,

$$\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle, \quad \hat{B}|\Psi\rangle = b|\Psi\rangle. \tag{6.144}$$

Если (6.144) выполнено, мы имеем

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \hat{A}b|\Psi\rangle = ba|\Psi\rangle, \quad \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle = ab|\Psi\rangle, \tag{6.145}$$

т. е. состояние $|\Psi\rangle$, где величины A и B одновременно измеримы, является собственным для *коммутатора* $[\hat{A},\hat{B}]$ с собственным значением равным нулю,

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle = [\hat{A},\hat{B}]|\Psi\rangle = 0. \tag{6.146}$$

Для произвольной пары величин A, B условие (6.145) может быть выполнено только для конкретных состояний $|\Psi\rangle$ и часто не может выполняться вообще. Однако существуют пары *коммутирующих* переменных, которые удовлетворяют *операторному* тождеству

$$[\hat{A},\hat{B}] = 0. \tag{6.147}$$

Покажем, что (6.147) является необходимым и достаточным условием существования полного набора состояний, которые являются одновременно собственными состояниями операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Тот факт, что уравнение (6.147) необходимо, почти очевиден. Предположим, что такая система состояний $|\Psi_{ab}\rangle \equiv |ab\rangle$ действительно существует. Тогда произвольный вектор $|\Psi\rangle$ можно разложить согласно

$$|\Psi\rangle = \sum_{ab} |ab\rangle\langle ab|\Psi\rangle. \tag{6.148}$$

Поскольку

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \sum_{ab} ab|ab\rangle\langle ab|\Psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle, \tag{6.149}$$

мы имеем для произвольного состояния $|\Psi\rangle$

$$[\hat{A},\hat{B}]|\Psi\rangle = 0, \tag{6.150}$$

и это эквивалентно (6.147).

Обратно, пусть (6.147) справедливо. Покажем сначала, что любой собственный вектор $|\Psi\rangle$ оператора $\hat{A}$ с *невырожденным* собственным значением a является в то же время собственным вектором $\hat{B}$. Из $\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ и коммутативности $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ следует, что

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle = \hat{B}a|\Psi\rangle = a\hat{B}|\Psi\rangle, \tag{6.151}$$

т. е. $\hat{B}|\Psi\rangle$ также является собственным вектором $\hat{A}$ с тем же собственным значением a. Так как a не вырождено, векторы $|\Psi\rangle$ и $\hat{B}|\Psi\rangle$ линейно зависимы, $\hat{B}|\Psi\rangle = b|\Psi\rangle$, а это означает, что $|\Psi\rangle$ также является собственным вектором оператора $\hat{B}$. Теперь предположим, что собственное значение a оператора $\hat{A}$ является d-кратно вырожденным. Как указывалось выше (раздел 6.8), в данном ограниченном d-мерном пространстве мы можем всегда диагонализовать оператор $\hat{B}$. В результате получим линейные комбинации, которые являются собственными векторами оператора $\hat{B}$, причём любая линейная комбинация векторов в этом подпространстве автоматически является собственным вектором оператора $\hat{A}$.

Задача 6.13

Пусть $\hat{B}$ и $\hat{C}$ два оператора, коммутирующих с $\hat{A}$, $|a\rangle$ — собственное состояние $\hat{A}$ с собственным значением a, и $[\hat{B},\hat{C}]|a\rangle \neq 0$. Докажите, что собственное значение a является вырожденным.

Ситуация, описанная в последней задаче, показывает пути к нахождению *дополнительных квантовых чисел* для того, чтобы иметь возможность различать между состояниями, вырожденными по отношению к некоторому оператору, в данном случае — по отношению к оператору $\hat{A}$. Отсюда следует, что, по крайней мере, один из векторов $\hat{B}|a\rangle$ и $\hat{C}|a\rangle$ (или оба) являются линейно независимыми от $|a\rangle$. Пусть, например, $|a\rangle$ и $|\hat{B}|a\rangle$ линейно независимы. Мы можем диагонализовать оператор $\hat{B}$ в вырожденном подпространстве $\hat{A}$. Векторы нового базиса имеют одинаковые собственные значения a оператора $\hat{A}$, но собственные значения b оператора $\hat{B}$ не могут быть все равными (докажите это!). Таким образом, собственные значения b_i могут быть использованы для классификация различных состояний с одним и тем же значением a.

Задача 6.14

Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ антикоммутируют, $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$. Могут ли они одновременно иметь определённые значения? Приведите пример антикоммутирующих операторов.

6.14 Количественное описание соотношения неопределённостей

Рассмотрим пару эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ и состояние $|\Psi\rangle$, причём

$$[\hat{A},\hat{B}]|\Psi\rangle \neq 0. \tag{6.152}$$

Как следует из предыдущего раздела, в состоянии $|\Psi\rangle$ эти два оператора не могут иметь одновременно определённые значения; по крайней мере, одна из неопределённостей, $(\Delta A)_\Psi$ или $(\Delta B)_\Psi$, должна быть отлична от нуля.

Поскольку коммутатор двух эрмитовых операторов меняет свой знак при эрмитовом сопряжении (см. уравнение (6.69)), мы всегда можем определить эрмитов оператор $\hat{C}$ таким образом, что

$$[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}, \quad \hat{C}^\dagger = \hat{C}. \tag{6.153}$$

Мы также можем вычесть вещественные средние значения $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в данном состоянии и использовать новые, также эрмитовы, операторы

$$\hat{A}' = \hat{A} - \langle A\rangle_\Psi, \quad \hat{B}' = \hat{B} - \langle B\rangle_\Psi. \tag{6.154}$$

Вычитание констант не меняет коммутатор,

$$[\hat{A}', \hat{B}'] = i\hat{C}. \tag{6.155}$$

Построим теперь новое состояние

$$|\tilde{\Psi}\rangle = (\hat{A}' + i\alpha\hat{B}')|\Psi\rangle, \tag{6.156}$$

где α — произвольный вещественный параметр. Так как, в соответствии с условием (6.27),

$$\langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle \geqslant 0, \tag{6.157}$$

получаем

$$0 \leqslant \langle(\hat{A}'+i\alpha\hat{B}')\Psi|(\hat{A}'+i\alpha\hat{B}')|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{A}'+i\alpha\hat{B}')^\dagger(\hat{A}'+i\alpha\hat{B}')|\Psi\rangle \tag{6.158}$$

или

$$0 \leqslant \langle\Psi|(\hat{A}'-i\alpha\hat{B}')(\hat{A}'+i\alpha\hat{B}')|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{A}'^2+i\alpha[\hat{A}',\hat{B}']+\alpha^2\hat{B}'^2)|\Psi\rangle. \tag{6.159}$$

Величины, подобные $\langle\hat{A}'^2\rangle$, являются, по определению (6.143), квадратами неопределённостей в данном состоянии $(\Delta A)^2_\Psi$. Таким образом, последнее неравенство можно записать в виде соотношения, связывающего неопределённости некоммутирующих наблюдаемых,

$$(\Delta A)^2_\Psi - \alpha\langle C\rangle_\Psi + \alpha^2(\Delta B)^2_\Psi \geqslant 0. \tag{6.160}$$

Эта квадратичная форма должна быть положительной при любом вещественном значении α. Это имеет место, если корни являются комплексными числами или

$$4(\Delta A)^2_\Psi \cdot (\Delta B)^2_\Psi \geqslant \langle C\rangle^2_\Psi. \tag{6.161}$$

Мы получили количественную формулировку *соотношения неопределённостей*,

$$(\Delta A)_\Psi \cdot (\Delta B)_\Psi \geqslant \frac{1}{2}\,|\langle C\rangle_\Psi|. \tag{6.162}$$

Нижняя граница произведения неопределённостей для квантового состояния определяется средним значением коммутатора соответствующих операторов в этом состоянии.

Используя наши предыдущие результаты для коммутаторов (см. раздел 4.3), мы приходим к точной формулировке соотношений, которые ранее использовались только при качественном рассмотрении в разделе 5.1,

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}, \tag{6.163}$$

$$(\Delta \ell_x)_\Psi \cdot (\Delta \ell_y)_\Psi \geqslant \frac{\langle \ell_z\rangle_\Psi}{2}. \tag{6.164}$$

Заметим, что уравнение (6.163) определяет *универсальную* нижнюю границу, в то время как уравнение (6.164) зависит от состояния. Как мы видели в задаче 5.10, гауссовский волновой пакет (5.32) *минимизирует* соотношение неопределённостей (6.163).

Задача 6.15

Определим *информационную энтропию* $I[\psi]$ нормированной волновой функции $\psi(x)$ как функционал

$$I[\psi] = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\rho\,\ln\rho, \quad \rho = |\psi(x)|^2. \tag{6.165}$$

Покажите, что функционал (6.165) имеет максимальное значение для гауссовского волнового пакета (5.32) среди всех функций, удовлетворяющих дополнительным условиям нормировки и заданной неопределённости координаты,

$$\int dx\,\rho = 1, \quad \int dx\,\rho(x-\langle x\rangle)^2 = \Delta^2. \tag{6.166}$$

Решение.

Добавим интегралы (6.166) к функционалу (6.165) с множителями Лагранжа λ и λ' и найдём максимум по отношению к вариации $\delta\rho$. Тогда множи-

тели определяются при выполнении условий (6.166), что даёт

$$\rho_{\max} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}}\, e^{-(x-\langle x\rangle)^2/2\Delta^2}. \tag{6.167}$$

Максимальная энтропия равна

$$I_{\max} = \ln\sqrt{2\pi e \Delta^2}. \tag{6.168}$$

Выражения, подобные энтропии, приводят к оценке соотношения неопределённостей [20], которая сильнее, чем широко известный результат (6.163). Однако для доказательства требуется более сложный математический аппарат. При симметричном определении преобразования Фурье для координатной и импульсной волновых функций,

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ikx}\varphi(k), \quad \varphi(k) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-ikx}\psi(x), \tag{6.169}$$

можно ввести обобщённую норму,

$$\mathcal{N}_n^{(x)} = \left(\int dx|\psi(x)|^n\right)^{1/n}, \tag{6.170}$$

и аналогично для $\mathcal{N}_n^{(k)}$. Будем предполагать стандартную нормировку

$$\mathcal{N}_2^{(x)} = \mathcal{N}_2^{(k)} = 1. \tag{6.171}$$

Пусть n и n' — положительные числа, удовлетворяющие условию

$$\frac{1}{n} + \frac{1}{n'} = 1, \tag{6.172}$$

так что $n \geqslant 2$ и $n' \leqslant 2$. Тогда имеет место неравенство [21],

$$F(n) \equiv \left(\frac{2\pi}{n}\right)^{1/2n} \mathcal{N}_{n'}^{(k)} - \left(\frac{2\pi}{n'}\right)^{1/2n'} \mathcal{N}_n^{(x)} \geqslant 0. \tag{6.173}$$

Здесь n' является функцией n, определённой согласно уравнению (6.172). При $n = n' = 2$ $F(2) = 0$ за счёт нормировки (6.171). Таким образом, как следует из (6.173), производная $dF/dn \geqslant 0$ при $n = 2$. Непосредственное вычисление этой производной даёт замечательное неравенство, связывающее

информационные энтропии для функций координаты и импульса,

$$I[\psi(x)] + I[\varphi(k)] \geqslant 1 + \ln(\pi) = \ln(e\pi). \tag{6.174}$$

Доказательство может быть распространено на функции многих переменных, когда преобразование Фурье выполняется по отношению ко всем из них; в этом случае правую часть уравнения (6.174) необходимо умножить на величину размерности d. Поскольку гауссовские функции обеспечивают максимальную энтропию, уравнение (6.168) можно связать с неопределённостями Δ_k и Δ_x с помощью ряда неравенств [20],

$$\Delta_k^2 \geqslant \frac{1}{2\pi e}\, e^{2I[\varphi(k)]} \geqslant \frac{\pi e}{2}\, e^{-2I[\psi(x)]} \geqslant \frac{1}{4\Delta_x^2}. \tag{6.175}$$

Для гауссовых функций неравенства обращаются в равенства; граничные значения величин в (6.175) дают стандартное соотношение неопределённостей (6.163).

Задача 6.16

Рассмотрим частицу массы m в n-м стационарном состоянии в непроницаемом потенциальном ящике шириной a. Найдите функцию распределения и средние значения координаты и импульса частицы, средний квадрат флуктуаций координаты и импульса, а также проверьте соотношение неопределённостей; вычислите среднюю кинетическую энергию и средний квадрат её флуктуаций.

Решение.

Нормированная стационарная волновая функция частицы, заключённой в потенциальном ящике $0 \leqslant x \leqslant a$ (см. (3.6)), даёт распределение координат в n-м состоянии:

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \tag{6.176}$$

Фурье-преобразование приводит к волновой функции в импульсном представлении

$$\begin{aligned}\varphi_n(p) &= \int_0^a dx\, e^{-(i/\hbar)px}\psi_n(x) = \\ &= \sqrt{2}a\left[1 - (-)^n e^{-(i/\hbar)pa}\right]\frac{(\pi n/a)}{(\pi n/a)^2 - (p/\hbar)^2}.\end{aligned} \tag{6.177}$$

Отсюда находим функцию распределения по импульсу

$$w_n(p) = |\varphi_n(p)|^2 = \frac{4}{a}[1 - (-)^n \cos(pa/\hbar)] \frac{(\pi n/a)^2}{[(\pi n/a)^2 - (p/\hbar)^2]^2}. \quad (6.178)$$

Кажущаяся расходимость в точках $p = \pm n\pi\hbar/a$ компенсируется нулями выражения в первой квадратной скобке.

Для последующих расчётов нам понадобятся интегралы

$$\int dx\, x \sin^2 x = \frac{1}{4}\left[x^2 - x\sin(2x) - \frac{1}{2}\cos(2x)\right], \quad (6.179)$$

$$\int dx\, x^2 \sin^2 x = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4} - \frac{1}{8}\right)\sin(2x) - \frac{x\cos(2x)}{4}. \quad (6.180)$$

Очевидно, что среднее значение координаты находится в середине ящика,

$$\langle n|x|n\rangle = \int_0^a dx\, x|\psi_n(x)|^2 = \frac{a}{2}. \quad (6.181)$$

Величина среднего квадрата координаты равна

$$\langle n|x^2|n\rangle = a^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2(\pi n)^2}\right], \quad (6.182)$$

и дисперсия координаты составляет

$$(\Delta x)^2_n = \langle n|x^2|n\rangle - \langle n|x|n\rangle^2 = \frac{a^2}{12}\left[1 - \frac{6}{(\pi n)^2}\right]. \quad (6.183)$$

При больших n результаты приближаются к классическому равномерному распределению вероятностей между $x = 0$ и $x = a$. Действительно, квантовые вероятности (6.176) быстро осциллируют и можно заменить $\sin^2(\pi n/x)$ его средним значением $1/2$, так что $|\psi_n(x)|^2 \Rightarrow 1/a$.

Для вычисления средних значений p и p^2 проще всего использовать координатное представление и соответствующий оператор $\hat{p} = -i\hbar(d/dx)$. Тогда сразу видно, что

$$\langle n|\hat{p}|n\rangle = 0, \quad (6.184)$$

как и должно быть для *стоячей волны*. Средний квадрат импульса равен

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = (\Delta p)_n^2 = \left(\frac{\pi\hbar n}{a}\right)^2, \tag{6.185}$$

что легко получить, зная энергию частицы (внутри ящика полная энергия равна кинетической),

$$E_n = \langle n|\hat{K}|n\rangle = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} = \frac{\langle n|\hat{p}^2|n\rangle}{2m}. \tag{6.186}$$

Для произведения неопределённостей из (6.183) и (6.185) получаем:

$$(\Delta x)_n^2\,(\Delta p)_n^2 = \frac{\hbar^2}{12}\left[(\pi n)^2 - 6\right]. \tag{6.187}$$

Соотношение неопределённостей выполняется даже для минимального случая $n = 1$,

$$(\Delta x)_1(\Delta p)_1 = \hbar\frac{\sqrt{\pi^2 - 6}}{2\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}. \tag{6.188}$$

При рассмотрении флуктуаций кинетической энергии ситуация кажется противоречивой. На первый взгляд, так как внутри ящика полная энергия сводится к кинетической, $E \to K$, значение энергии, равное E_n, фиксировано и, следовательно, кинетическая энергия не флуктуирует, $\langle n|\hat{K}^2|n\rangle = \langle n|\hat{K}|n\rangle^2$. С другой стороны, если мы воспользуемся для расчёта плотностью вероятности распределения по импульсам (6.178),

$$\langle n|\hat{K}^2|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar}\, w_n(p)\, \frac{p^4}{4m^2}, \tag{6.189}$$

то увидим, что этот интеграл *расходится* при больших импульсах. Действительно, при $|p| \to \infty$ распределение плотности $w_n(p) \propto p^{-4}$ и интеграл от $w_n(p) \times p^4$ (6.189) является *расходящимся*.

Чтобы разрешить это противоречие, мы должны обсудить процедуру физического измерения. При измерении величины кинетической энергии частицы, заключённой в ящик, мы должны моментально удалить стенки и позволить частице свободно двигаться. При внезапном возмущении (задача 3.3) волновая функция не успевает измениться, но импульс становится интегралом движения (так как потенциальных стенок больше нет), так что каждая компонента импульса распространяется независимо и может быть

зарегистрирована с вероятностью $w_n(p)$. Повторяя эксперимент много раз, можно получить функцию распределения по импульсу или кинетической энергии. Тогда результат должен совпасть с расчётом в соответствии с уравнением (6.189) и дать $\langle K^2 \rangle \to \infty$. Фактически это реальный способ измерения импульсного распределения атомов в ловушке, например, в исследованиях *конденсата Бозе — Эйнштейна*. Ловушка внезапно удаляется и измеряются импульсы свободных атомов (в таких экспериментах потенциал ловушки близок к потенциалу гармонического осциллятора).

Правильное рассмотрение в координатном представлении приводит к тому же заключению о расходимости. Действительно, имея в виду процедуру измерения, мы должны рассматривать волновую функцию *во всём пространстве*. Условие $\psi = 0$ на стенке есть результат предельного перехода от конечного потенциала к бесконечно высокой потенциальной стенке. В этом процессе кинетическая энергия не равна общей энергии из-за наличия стенок. Как функция во всем пространстве, волновая функции непрерывна на стенке, ее первая производная имеет конечный разрыв (равна нулю снаружи и конечна внутри), а вторая производная *бесконечна* из-за наличия бесконечного потенциала. Эта бесконечность порождает очень высокие Фурье-гармоники, приводящие к расходимости интеграла в импульсном представлении. Поэтому вычисление $\langle \hat{p}^4 \rangle$ должно проводиться следующим образом:

$$\langle n|\hat{p}^4|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n^*(x)\hat{p}^4\psi_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \left|\hat{p^2}\psi_n(x)\right|^2, \tag{6.190}$$

где мы использовали эрмитовость оператора $\hat{p}^2$ и теперь видим, что интеграл содержит квадрат второй производной волновой функции. Вторая производная бесконечна на границах, т. е. интеграл содержит вклады $\delta(x)$ и $\delta(x-a)$, пропорциональные бесконечному потенциалу. Интеграл $\int dx\, [\delta(x)]^2 = \delta(0)$ бесконечен. Конечно, всё это является следствием идеализированной модели с бесконечно высокими потенциальными стенками.

Задача 6.17

Все практические измерения имеют свои собственные ошибки, не связанные с квантовыми ограничениями. Предположим, что частица находится в квантовом состоянии $\psi(x)$ со средним значением $\langle x \rangle$ её координаты и квантовой неопределённостью $(\Delta x)^2$. Экспериментальное устройство характеризуется вероятностью $w(\xi)$ отклонения ξ результата измерения

от фактического положения. Найдите среднюю величину результата многих измерений $\bar{x}$ и его дисперсию $\mathrm{Var}(x) = \bar{x^2} - \bar{x}^2$.

Решение.

Вероятность получения результата x даётся выражением

$$P(x) = \int dx'\, w(x - x')|\psi(x')|^2, \tag{6.191}$$

где $\psi(x)$ нормирована на единицу. Используя это распределение вероятностей, мы находим

$$\bar{x} = \langle x \rangle + \int d\xi\, w(\xi)\xi \equiv \langle x \rangle + \bar{\xi}, \tag{6.192}$$

$$\mathrm{Var}(x) = (\Delta x)^2 + \int d\xi\, w(\xi)\xi^2 - (\bar{\xi})^2 \equiv (\Delta x)^2 + \mathrm{Var}(\xi). \tag{6.193}$$

Квантовые и экспериментальные неопределённости складываются квадратично.

Дополнительная литература: [7, 22–26].

Научно обоснованная теория всегда
должна содержать классическую
механику как предельный случай.

Вольфганг Эрнст Паули, *«Волновая механика»*

Глава 7

Квантовая динамика

7.1 Гамильтониан и уравнение Шрёдингера

Законы временно́й эволюции квантово-механических состояний ограничены принципами, которые уже появлялись в наших предыдущих рассуждениях.

(i) Волновая функция содержит *полную информацию* (разрешённую квантовыми соотношениями неопределённостей) о вероятностях возможных измерений в системе.

(ii) *Принцип суперпозиции* говорит нам, что сумма решений уравнения движения также должна быть возможным решением.

(iii) *Стационарное состояние*, т. е. состояние с определённой энергией E, эволюционирует *монохроматически* $\sim \exp[-(i/\hbar)Et]$, приобретая только фазу и, следовательно, сохраняя все вероятности.

Из (ii) следует, что уравнение движения должно быть *линейным* относительно вектора состояния или волновой функции. Согласно (i), знание волновой функции $|\Psi(0)\rangle$ в начальный момент времени $t = 0$ уже предопределяет его квантовую (не возмущаемую измерениями) эволюцию. В частности, волновая функция в очень близкий момент времени или её производная по времени также определяются $|\Psi(0)\rangle$. Так как эта зависимость линейна, производная является линейным функционалом самой функции. Этот функционал может быть представлен линейным *оператором Гамильтона*, или *гамильтонианом* $\hat{H}$, так, чтобы выполнялось

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle. \tag{7.1}$$

Это *уравнение Шрёдингера*, которому подчиняется развитие во времени любой квантовой системы. Из условия (iii) мы знаем, что для стационарного

состояния зависимость от времени имеет вид

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi\rangle e^{-(i/\hbar)Et}, \quad |\psi\rangle = |\Psi(0)\rangle. \tag{7.2}$$

Тогда из уравнения (7.1) видно, что энергия E стационарного состояния является *собственным значением* гамильтониана и независящий от времени вектор состояния $|\psi\rangle$ является соответствующим собственным вектором,

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{7.3}$$

Как оператор вещественной наблюдаемой величины, гамильтониан является *эрмитовым оператором.*

Если гамильтониан $\hat{H}$ явно не зависит от времени, мы говорим о *закрытой* или изолированной системе. Это не означает, что фактическое состояние системы стационарно — всё зависит от начальных условий. Тем не менее в этом случае уравнение Шрёдингера (7.1) допускает формальное решение

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle, \tag{7.4}$$

которое сводится к (7.2) для стационарного начального состояния. В общем случае начальное состояние есть произвольная суперпозиция стационарных состояний $|n\rangle$, которые могут принадлежать как дискретному, так и непрерывному спектру:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle. \tag{7.5}$$

Состояния $|n\rangle$ образуют полный ортонормированный набор в качестве собственных состояний эрмитового оператора, поэтому коэффициенты разложения в (7.5) равны

$$c_n = \langle n|\Psi(0)\rangle. \tag{7.6}$$

Теперь формальное решение (7.4) уравнения Шрёдингера может быть записано (см. для сравнения раздел 3.4) как

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle e^{-(i/\hbar)E_n t}. \tag{7.7}$$

Задача 7.1

Одномерный гармонический осциллятор имеет дискретный энергетический спектр,

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{7.8}$$

Осциллятор приготовлен в начальном состоянии $\Psi(0) = A(\psi_1+\psi_2+\psi_3)$, $A \neq 0$, где ψ_n — нормированные волновые функции стационарных n-квантовых состояний. Будет ли волновая функция в какой-то момент $t > 0$ принимать вид

а) $\psi = B\Big[\psi_1 + (1/\sqrt{2})(\psi_2 + \psi_3)\Big]$;
б) $\psi = C(\psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4)$;
в) $\psi = D(\psi_1 - \psi_2 + \psi_3)$;
г) $\psi = F(\psi_1 - \psi_2 - \psi_3)$;
д) $\psi = G(\psi_1 + i\psi_2 - \psi_3)$?

Коэффициенты в этих примерах являются константами.

Решение.

Возможны варианты *в* и *д*.

Амплитуды вероятности c_n нахождения компонент с энергией E_n определяют волновую функцию в *энергетическом представлении*. Соответствующие вероятности, $|c_n|^2$, не зависят от времени для любой замкнутой системы. Произвольные операторы $\hat{A}$ без явной зависимости от времени могут иметь неисчезающие, зависящие от времени матричные элементы между двумя состояниями $|\Psi_1(t)\rangle$ и $|\Psi_2(t)\rangle$, хотя возможная зависимость полностью определяется энергетическим спектром:

$$\langle\Psi_2(t)|\hat{A}|\Psi_1(t)\rangle = \sum_{mn} c_n^{(2)*} c_m^{(1)} A_{nm} e^{-i\omega_{mn}t}. \tag{7.9}$$

Здесь мы используем амплитуды в энергетическом представлении для обоих состояний, $c_m^{(1)}$ и $c_n^{(2)}$, стандартное определение матричных элементов A_{nm} (уравнение (6.55)) и частоты перехода ω_{mn} (уравнение (1.41)) между стационарными состояниями. Таким образом, спектр преобразования Фурье матричного элемента (7.9) содержит только частоты, соответствующие возможным переходам между стационарными уровнями системы.

Формальное решение (7.4) является новым примером *унитарного преобразования* (см. раздел 6.9). Подобно пространственным сдвигам, порождаемым оператором импульса (4.54), мы имеем сдвиг системы во времени, который естественно выполняется за счёт внутренней динамики. В самом

деле, скалярные произведения векторов состояния не зависят от времени (задача 4.1): для оператора $\hat{A} \Rightarrow \hat{1}$, $A_{nm} = \delta_{nm}$,

$$\langle\Psi_2(t)|\Psi_1(t)\rangle = \sum_{mn} c_n^{(2)*} c_m^{(1)} \delta_{nm} e^{-i\omega_{mn}t} = \sum_n c_n^{(2)*} c_n^{(1)} = \langle\Psi_2(0)|\Psi_1(0)\rangle. \tag{7.10}$$

Таким образом, квантовая эволюция замкнутой системы является унитарным преобразованием

$$\hat{U}(t) = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}, \tag{7.11}$$

в котором время является непрерывным параметром, а гамильтониан — соответствующим генератором (6.112).

7.2 Одночастичный гамильтониан

Конкретный вид гамильтониана для данной квантовой системы не может быть «выведен». В классической механике лагранжиан или гамильтониан главным образом берутся из эксперимента в соответствии с некоторыми общими принципами. В квантовой теории руководящими принципами могут быть только соображения симметрии, соответствие классическому пределу (раздел 1.7) и результаты эксперимента.

В разделе 4.2 мы ввели явно операторы координаты и импульса, действующие на волновые функции в координатном и импульсном представлениях. Теперь используем эти знания, чтобы прийти к уравнению Шрёдингера с определённым гамильтонианом. Прежде всего, мы должны преобразовать уравнение (7.1) для абстрактного вектора состояния в уравнение для волновой функции в фиксированном представлении.

В координатном представлении для одночастичной системы волновая функция является проекцией вектора состояния на состояние, локализованное в данной точке,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle\mathbf{r}|\Psi(t)\rangle. \tag{7.12}$$

Здесь базисное состояние $|\mathbf{r}\rangle$ не зависит от времени, в то время как вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$ эволюционирует в соответствии с уравнением (7.1). Вставляя полный набор локализованных состояний $|\mathbf{r}'\rangle$ с помощью условия полноты (6.49), получаем

$$\int d^3r'\, |\mathbf{r}'\rangle\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r}'|\Psi(t)\rangle = \int d^3r'\, \hat{H}|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\Psi(t)\rangle, \tag{7.13}$$

что может быть записано в терминах координатной волновой функции,

$$\int d^3r'\, |\mathbf{r}'\rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}', t) = \int d^3r'\, \hat{H}|\mathbf{r}'\rangle\Psi(\mathbf{r}', t). \tag{7.14}$$

Спроектируем это уравнение на фиксированный бра-вектор локализованного состояния $\langle \mathbf{r}|$. Используя ортогональность

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{7.15}$$

получаем уравнение для зависящей от времени координатной волновой функции,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int d^3r'\, \langle \mathbf{r}|\hat{H}|\mathbf{r}'\rangle\Psi(\mathbf{r}', t). \tag{7.16}$$

В общем случае это уравнение является интегральным (*нелокальным*) уравнением.

Матричные элементы $\langle \mathbf{r}|\hat{H}|\mathbf{r}'\rangle$ (*ядро* оператора $\hat{H}$) могут быть найдены при условии, что мы берём квантовый гамильтониан в виде его классического аналога — функции Гамильтона частицы в потенциальном поле, путём подстановки вместо классических динамических переменных $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ квантовых операторов. В координатном представлении (раздел 4.2)

$$\mathbf{r} \Rightarrow \hat{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{p} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{7.17}$$

Найдём матричные элементы $\langle \mathbf{r}|...|\mathbf{r}'\rangle$ этих операторов. Для оператора координаты, который обозначен как $\hat{\mathbf{x}}$, явно вводя локализованные волновые функции, получаем

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{r}'\rangle = \int d^3x\, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r})\mathbf{x}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}') = \mathbf{r}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{7.18}$$

Для оператора импульса имеем следующее выражение:

$$\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle = \int d^3x\, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r})(-i\hbar\nabla_{\mathbf{x}})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}'). \tag{7.19}$$

Используя симметрию дельта-функции, мы можем вынести производную из-под интеграла:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle &= i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'}\int d^3x\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r})\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r}') = i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \\ &= -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').\end{aligned} \tag{7.20}$$

Для любой аналитической функции $F(\hat{\mathbf{p}})$ получаем

$$\langle \mathbf{r}|F(\hat{\mathbf{p}})|\mathbf{r}'\rangle = F(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{7.21}$$

Применяя этот рецепт для гамильтониана,

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}), \tag{7.22}$$

и интегрируя по $\mathbf{r}'$ в (7.16), приходим к уравнению Шрёдингера в координатном представлении

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})\Psi(\mathbf{r},t), \tag{7.23}$$

где $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ действуют, как и раньше (раздел 4.2), на функции координат $\mathbf{r}$.

Для общего случая этот рецепт не вполне определён из-за возможного различного упорядочения некоммутирующих операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$. В нерелятивистской квантовой механике мы допускаем, что одночастичный гамильтониан $\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$ частицы с массой m в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ может быть взят из классической механики с операторной подстановкой (7.17)

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}, \tag{7.24}$$

где нерелятивистская кинетическая энергия даётся

$$\hat{K} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \tag{7.25}$$

или в координатном представлении (7.17)

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2. \tag{7.26}$$

Собственные функции оператора кинетической энергии являются плоскими волнами; если энергия зависит только от абсолютной величины импульса $\mathbf{p}$,

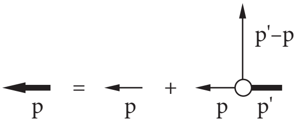

Рис. 7.1: Диаграммы эволюции волновой функции в импульсном представлении

каждое ненулевое собственное значение энергии бесконечно *вырождено*, так как все направления $\mathbf{p}$ эквивалентны.

В присутствии потенциала плоские волны перестают быть собственными функциями гамильтониана. Потенциальная энергия $\hat{U} = U(\hat{\mathbf{r}})$ в координатном представлении является просто классической функцией $U(\mathbf{r})$. Таким образом, мы можем сформулировать квантовую задачу для частицы во внешнем потенциальном поле как уравнение в частных производных

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t). \tag{7.27}$$

В уравнении (7.27) потенциал U в общем случае может также зависеть от времени. Для постоянных потенциалов мы можем искать *стационарные состояния* с чисто монохроматической зависимостью от времени, которая характеризуется энергией E (см. уравнение (7.2)). Соответствующее стационарное уравнение Шрёдингера (7.3) для координатной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-(i/\hbar)Et}, \quad \psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle, \tag{7.28}$$

имеет вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{7.29}$$

При заранее не известном энергетическом спектре уравнение (7.29) является *задачей на собственные значения.*

Задача 7.2

Выведите одночастичное уравнение Шрёдингера для волновой функции $\Phi(\mathbf{p}, t)$ (уравнение (4.4)) в *импульсном представлении*,

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{p}, t) &= \int d^3r\, e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\Psi(\mathbf{r}, t),\\ \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\Phi(\mathbf{p}, t).\end{aligned} \tag{7.30}$$

Решение.

Так как функция $U(\mathbf{r})$ в общем случае задаётся с помощью бесконечного операторного ряда $U(i\hbar\nabla_p)$, мы приходим к *интегральному* уравнению:

$$i\hbar\,\frac{\partial\Phi(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\,\Phi(\mathbf{p}, t) + \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\,U_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}}\,\Phi(\mathbf{p}', t), \tag{7.31}$$

где Фурье-компонента потенциальной энергии определяется как

$$U_{\mathbf{p}} = \int d^3r\, e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}U(\mathbf{r}). \tag{7.32}$$

Мы можем интерпретировать интегральный член в уравнении (7.31) как описание процесса на рис. 7.1, где частица передаёт импульс $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$ источнику внешнего потенциала, преобразуя $\Phi(\mathbf{p}')$ в $\Phi(\mathbf{p})$; при этом учитываются все возможности.

Простейшие квантовые задачи, обсуждавшиеся в главах 3 и 4, были связаны с кусочно-постоянными потенциалами. В области, где $U(\mathbf{r}) = U_0$ является константой, стационарное уравнение (7.29) приобретает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = (E - U_0)\psi(\mathbf{r}) \tag{7.33}$$

и общее решения при заданной энергии E является произвольной суперпозицией плоских волн с различными волновыми векторами $\mathbf{k}$, но с одной и той же энергией

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}, \qquad \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} = E - U_0. \tag{7.34}$$

Это позволило нам решить многие задачи без фактического решения уравнений, но с использованием понятия квантовых волн. Коэффициенты суперпозиции (7.34) могут быть найдены в соответствии с конкретными

особенностями задачи. На границах различных частей потенциала решения сшиваются для того, чтобы сохранять энергию фиксированной. Сшивание функции и её первой производной обусловлено требованием к уравнению Шрёдингера, которое должно выполняться всюду, в том числе и в точках разрыва потенциала. Вторая производная волновой функции, в соответствии с уравнением, имеет те же скачки, что и потенциал. Уравнение для гладкого потенциала может быть «выведено» путём деления области движения на очень мелкие фрагменты и аппроксимации потенциала константой внутри каждой части, как мы это делали для того, чтобы получить вероятности туннельных переходов (см. раздел 2.7).

Задача 7.3

а) Моделью некоторых молекул может быть плоский *ротатор* — система с одной степенью свободы (азимутальным углом φ), которая описывается гамильтонианом вращения, где повороты порождаются оператором $\hat{\ell}_z$ — проекции углового момента на ось вращения,

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \hat{\ell}_z^2}{2I}. \tag{7.35}$$

Здесь I — момент инерции. Найдите нормированные собственные функции плоского ротатора, собственные значения энергии и их вырождение. Из вырожденных собственных функций постройте их комбинации, имеющие определённую чётность при отражениях в плоскости относительно оси x.

б) Рассмотрите состояние ротатора с угловой волновой функцией

$$\psi(\varphi) = A \cos^n \varphi, \quad n \text{ целое } \geqslant 0. \tag{7.36}$$

Найдите распределение вероятностей проекции $m = \ell_z$ и энергии, а также средние значения этих величин.

Решение.

а) Собственные функции ротатора принадлежат оператору $\hat{\ell}_z$ (см. уравнение (4.72)). Собственные значения энергии выражаются через собственные значения m оператора $\hat{\ell}_z$:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}. \tag{7.37}$$

Все энергии с $|m| \neq 0$ дважды вырождены, не вырождено только основное состояние $m = 0$, $E_0{=}0$. Отражение относительно оси x изме-

няет угол $\varphi \to -\varphi$. Функциями с определённой x-чётностью являются $\cos(m\varphi)$ с положительной x-чётностью и $\sin(m\varphi)$ с отрицательной x-чётностью. Так как переход от исходного набора (4.72) происходит внутри вырожденного множества функций, эти функции также представляют стационарные состояния, но в данном случае эти суперпозиции являются стоячими волнами. Как мы увидим в главе 8, новые состояния инвариантны относительно обращения времени, в то время как исходные состояния соответствуют бегущим (циркулирующим) волнам с определённым направлением вращения; при обращении времени они переходят друг в друга.

б) С помощью биномиальной формулы разложим нашу функцию в ряд Фурье:

$$\begin{aligned}\psi(\varphi) &= A\left(\frac{e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}}{2}\right)^n = A\frac{e^{in\varphi}}{2^n}\left(1+e^{-2i\varphi}\right)^n = \\ &= A\frac{e^{in\varphi}}{2^n}\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!(n-k)!}e^{-2ik\varphi}.\end{aligned} \tag{7.38}$$

Это не что иное, как разложение по полному набору (4.72),

$$\psi(\varphi) = \frac{A\sqrt{2\pi}}{2^n}\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!(n-k)!}\psi_{n-2k}(\varphi). \tag{7.39}$$

Можно нормировать нашу функцию, вычислив таким же методом $|\psi|^2$:

$$1 = |A|^2\int_0^{2\pi} d\varphi\,\cos^{2n}\varphi = \frac{|A|^2}{2^{2n}}\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{2in\varphi}(1+e^{-2i\varphi})^{2n}. \tag{7.40}$$

Опять же с помощью биномиального разложения получаем

$$1 = \frac{|A|^2}{2^{2n}}\sum_{k=0}^{2n}\frac{(2n)!}{k!(2n-k)!}\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{2i(n-k)\varphi}. \tag{7.41}$$

Из ортонормированности $\psi_m(\varphi)$ следует, что в сумме остаётся только член $k=n$, и

$$1 = |A|^2\frac{2\pi}{2^{2n}}\frac{(2n)!}{(n!)^2} = |A|^2\frac{2\pi(2n-1)!!}{2^n n!}. \tag{7.42}$$

Из (7.39) получаем, что волновая функция даёт ненулевые вероятности всех проекций орбитального момента $m = n - 2k$ с k и m, пробегающими значения от $k = n$, где $m = -n$, до $k = 0$, и $m = n$. Таким образом, допустимые значения m равны, в соответствии с чётностью состояния,

$$m = -n, -n+2, ..., n-2, n. \tag{7.43}$$

Сделав замену $k = (n-m)/2$ и взяв нормировочную константу из (7.42), получаем распределение вероятности

$$\begin{aligned} P(m) &= \frac{|A|^2 2\pi}{2^{2n}} \left\{ \frac{n!}{[(n+m)/2]![(n-m)/2]!} \right\}^2 = \\ &= \frac{n!}{2^n (2n-1)!!} \left\{ \frac{n!}{[(n+m)/2]![(n-m)/2]!} \right\}^2 . \end{aligned} \tag{7.44}$$

Из-за симметрии относительно знака m (на самом деле симметрии относительно обращения времени) получаем

$$\langle \hat{\ell}_z \rangle = 0; \tag{7.45}$$

это можно было бы понять без расчётов, поскольку волновая функция является вещественной.

Чтобы найти распределение по энергии, мы должны принять во внимание, что состояния ψ_m и ψ_{-m} вырождены. Таким образом, вероятность нахождения энергии E_m при $m \neq 0$ равна

$$P_E(m) = P(m) + P(-m) = 2P(m), \tag{7.46}$$

где мы должны учитывать только положительные m с той же чётностью, что n. Для нулевой проекции, которая возможна только при чётном n,

$$P_E(0) = P(0). \tag{7.47}$$

Среднее значение энергии может быть найдено многими способами, например, с помощью прямого вычисления

$$\langle H \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \, \psi^*(\varphi) \hat{H} \psi(\varphi). \tag{7.48}$$

Здесь мы должны использовать

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\cos^n\varphi = [n(n-1) - n^2\cos^2\varphi]\cos^{n-2}\varphi. \tag{7.49}$$

Тогда (7.48) принимает вид

$$\langle H\rangle = \frac{\hbar^2|A|^2}{2I}\int_0^{2\pi} d\varphi\,[n^2\cos^{2n}\varphi - n(n-1)\cos^{2n-2}\varphi]. \tag{7.50}$$

Простой расчёт в соответствии с изложенным выше со значением $|A|^2$ из (7.42) приводит к

$$\langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{2I}\frac{n^2}{2n-1}. \tag{7.51}$$

Конечно, значение $n = 0$ допускает только $m = 0$ и $E = 0$.

7.3 Уравнение непрерывности

Плотность вероятности (2.5) нахождения частицы вблизи точки $\mathbf{r}$ меняется со временем. Эта эволюция определяется уравнением Шрёдингера (7.23), наряду с комплексно сопряженным уравнением,

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \hat{H}^*\Psi^*. \tag{7.52}$$

Из этих двух уравнений получаем

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \frac{1}{i\hbar}\Big\{\Psi^*(\hat{H}\Psi) - (\hat{H}^*\Psi^*)\Psi\Big\}; \tag{7.53}$$

данный результат не зависит от представления, которое мы используем. Плотность вероятности может измениться только тогда, когда либо волновая функция имеет нетривиальную (зависящую от переменных) комплексную фазу, либо гамильтониан представляет собой комплексную функцию, или имеют место обе эти причины.

Гамильтониан может быть комплексным, но оставаться эрмитовым. Напомним, что эрмитов оператор импульса (7.17) является мнимым в координатном представлении. Иногда бывает удобно описывать ситуацию с помощью искусственно введёного *комплексного потенциала* $U = V + iW$. Мнимая часть W добавляет новый член $(2/\hbar)\,\mathrm{Im}(U)\rho \equiv -\Gamma\rho$ в производную

плотности вероятности по времени (7.53). Если $\mathrm{Im}(U) < 0$, то плотность спадает экспоненциально $\sim \exp(-\Gamma t)$ со временем (см. раздел 5.8). Таким методом можно описывать распад системы или её связи с другими частями, которые не учитываются явно. Случай $\mathrm{Im}(U) > 0$ соответствует присутствию источника частиц.

Для одночастичного гамильтониана (7.24) с вещественным потенциалом только член кинетической энергии вносит вклад в эволюцию во времени (7.53), следовательно

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}\Big\{\Psi^*(\nabla^2\Psi)-(\nabla^2\Psi^*)\Psi\Big\} = -\frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot\Big\{\Psi^*(\nabla\Psi)-(\nabla\Psi^*)\Psi\Big\}. \quad (7.54)$$

Это *уравнение непрерывности* (2.11) с конкретным видом *тока вероятности*

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}\Big\{\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi\Big\}. \quad (7.55)$$

Как уже говорилось в разделе 2.2, уравнение непрерывности описывает сохранение полной вероятности (и нормировки волновой функции) (2.12). Для плоской волны, $\Psi = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$, ток (7.55) сводится к старому выражению (2.13). Используя оператор импульса $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, мы можем также записать ток (7.55) в виде

$$\mathbf{j} = \mathrm{Re}\Big\{\Psi^*\Big(\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\Psi\Big)\Big\}, \quad (7.56)$$

который напоминает гидродинамический смысл тока (2.8).

Задача 7.4

Частица движется во внешнем эрмитовом, но *нелокальном* потенциале $\hat{U}$, который определяется *ядром* $U(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ согласно

$$\hat{U}\Psi(\mathbf{r}) = \int d^3r'\, U(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}'). \quad (7.57)$$

Является ли уравнение непрерывности справедливым и в этом случае? Сохраняется ли во времени нормировка волновой функции?

Решение.

Используя гамильтониан $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$ с обычным оператором кинетической энергии $\hat{K}$ и с потенциальной энергией $\hat{U}$ (7.57), мы приходим к

аналогу уравнения непрерывности,

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = -\frac{i}{\hbar}\left\{\Psi^*(\mathbf{r},t)\int d^3r'\,U(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t) - \right. \\ \left. -\Psi(\mathbf{r},t)\int d^3r'\,U^*(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi^*(\mathbf{r}',t)\right\}, \tag{7.58}$$

со стандартными определениями ρ и $\mathbf{j}$. Обычное локальное уравнение непрерывности не выполняется: плотность вероятности может изменяться не только за счёт локального тока, но также и за счёт действия на расстоянии через поле $\hat{U}$. Однако из-за эрмитовости потенциала $U(\mathbf{r},\mathbf{r}') = U^*(\mathbf{r}',\mathbf{r})$, *полная вероятность* (нормировка) сохраняется:

$$\int d^3r\,\rho(\mathbf{r},t) = \text{const}. \tag{7.59}$$

Гидродинамическая аналогия тока может быть продолжена. Комплексная функция Ψ может быть записана через две вещественные функции: амплитуду $A(\mathbf{r},t)$, равную квадратному корню из плотности ρ, и фазу $S(\mathbf{r},t)$,

$$\Psi = \sqrt{\rho}\,e^{(i/\hbar)S}. \tag{7.60}$$

Вычислив ток в соответствии с уравнением (7.55), получаем

$$\mathbf{j} = \frac{\rho}{m}\nabla S, \tag{7.61}$$

т. е. величина $\nabla S/m$ играет роль скорости, связанной с волновой функцией, не только для плоской волны, но и для произвольного состояния. Опять же мы видим, что наличие нетривиальной фазы необходимо для существования тока вероятности.

Подставляя выражение (7.60) в уравнение Шрёдингера и выделяя действительную и мнимую части, можно получить два связанных уравнения для фазы S и амплитуды $A = \sqrt{\rho}$. Уравнение для мнимой части совпадает с уравнением непрерывности (2.11). Действительная часть сводится к выражению

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\left[\frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A}\right]. \tag{7.62}$$

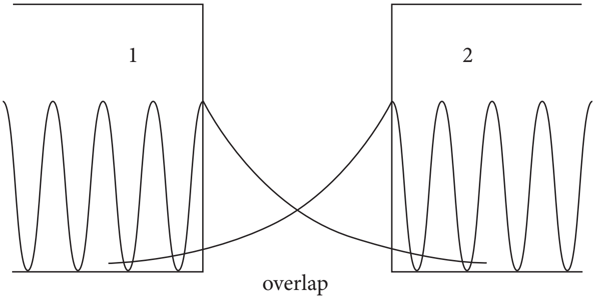

Рис. 7.2: Иллюстрация к задаче 7.5

В пределе $\hbar \to 0$ (7.62) переходит в классическое *уравнение Гамильтона-Якоби*:

$$H \Rightarrow -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \Rightarrow \nabla S, \tag{7.63}$$

где фаза S волновой функции совпадает с классическим *действием* вдоль траектории [13, §47]. Различные классические траектории, как лучи в геометрической оптике, ортогональны к поверхности $S = \text{const}$.

В каждой точке лучи имеют направление, определяемое градиентом S, который действительно играет роль скорости (7.61). Уравнение (7.62) для действия, в отличие от классической механики, не замкнуто из-за присутствия самосогласованного квантового «потенциала» $-(\hbar^2/2m)(\nabla^2 A/A)$, который зависит от амплитуды волнового пакета. Этот член отвечает за специфические свойства движения квантовой «жидкости», включая квантовую неопределённость, расплывание и т. д. (интерпретация квантовой механики *Д. Бома* [27]).

Задача 7.5

Два куска металла расположены так близко друг к другу, что хвосты электронных волновых функций перекрываются (см. рис. 7.2). Предполагая, что эти волновые функции вблизи внутренней поверхности $x = 0$ имеют вид

$$\psi_1(x) = A(x)e^{i\alpha} \quad \text{и} \quad \psi_2(x) = B(x)e^{i\beta}, \tag{7.64}$$

где $A(x)$ и $B(x)$ — вещественные функции, а α и β являются постоянными, но различными фазами, найти электрический ток через такой контакт. Для конкретного случая

$$A(x) = ae^{-\lambda x}, \quad B(x) = be^{\lambda x}, \tag{7.65}$$

где a, b и λ — вещественные константы ($\lambda > 0$), найдите максимально возможный ток через этот переход.

Решение.

В области перекрытия волновая функция представляет собой суперпозицию

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x). \tag{7.66}$$

При этом электрический ток является током вероятности (7.55), умноженным на величину заряда электрона e. После простых алгебраических преобразований мы находим (штрих означает производную по x)

$$j_e = \frac{e\hbar}{m}(BA' - AB')\sin(\alpha - \beta). \tag{7.67}$$

Такой ток через туннельный переход наблюдается в сверхпроводниках, разделённых тонким слоем вакуума или изолятора (*эффект Джозефсона*, раздел 14.5). Ток является сверхпроводящим, не требуя напряжения, приложенного к переходу. Движущей силой является разность фаз $\alpha - \beta$; в равновесии фазы равны и ток исчезает. (В сверхпроводниках ток переносится коррелированными электронными парами, $e \to 2e$.) При данном виде (7.65) хвостов волновых функций,

$$j_e = -\frac{2e\hbar ab\lambda}{m}\sin(\alpha - \beta), \tag{7.68}$$

ток является постоянным внутри перехода. Максимальная плотность тока достигается при разности фаз $|\alpha - \beta| = \pi/2$,

$$|j_e^{max}| = \frac{2e\hbar ab\lambda}{m}. \tag{7.69}$$

Общий ток может быть получен путём умножения плотности тока на площадь контакта.

Плотность вероятности и ток вероятности можно рассматривать как средние значения соответствующих операторов,

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \delta(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{r}), \tag{7.70}$$

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}[\hat{\mathbf{p}}, \delta(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{r})]_+, \tag{7.71}$$

где антикоммутатор был определён в (6.68) и $\mathbf{r}$ — координата точки наблюдения, в то время как $\hat{\mathbf{x}}$ является квантовым оператором координаты. Этот вид операторов тривиально обобщается на систему многих частиц (см. задачу 7.11).

7.4 Распределение Вигнера

В классической механике и в особенности в классической кинетической теории очень полезным понятием является функция распределения $f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ в шестимерном *фазовом пространстве*. Будучи нормированной на полное число частиц

$$\int d^3r\, d^3p\, f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = N, \tag{7.72}$$

эта функция содержит информацию о распределении частиц как по координате, так и по импульсу. Интеграл по импульсам даёт пространственную плотность

$$\int d^3p\, f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = \rho(\mathbf{r}), \tag{7.73}$$

в то время как интеграл по координатам определяет импульсное распределение,

$$\int d^3r\, f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = n_{\mathbf{p}}. \tag{7.74}$$

Можно построить так называемое *распределение Вигнера*, которое играет в квантовой механике такую же роль, как и функция распределения в фазовом пространстве в классической механике. Начнём с *матрицы плотности одной частицы* в пространстве координат

$$f(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_1)\Psi^*(\mathbf{r}_2), \tag{7.75}$$

где зависимость от времени не указана в явном виде (обе функции в уравнении (7.75) берутся в одно и то же время). Введём координаты системы центра масс двух точек в (7.75) и их относительное расстояние,

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \tag{7.76}$$

Распределение Вигнера $W(\mathbf{R},\mathbf{p})$ — это преобразование Фурье матрицы плотности (7.75) по отношению к относительной координате $\mathbf{r}$,

$$W(\mathbf{R},\mathbf{p}) = \int d^3r\, e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\Psi\Big(\mathbf{R}+\frac{\mathbf{r}}{2}\Big)\Psi^*\Big(\mathbf{R}-\frac{\mathbf{r}}{2}\Big). \tag{7.77}$$

Проверим интегральные свойства $W(\mathbf{R},\mathbf{p})$. Интеграл по $\mathbf{p}$ приводит к $\delta(\mathbf{r})$, тогда волновые функции берутся в одной точке, представляя, таким образом, пространственную плотность.

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, W(\mathbf{R},\mathbf{p}) = |\Psi(\mathbf{R})|^2 \equiv \rho(\mathbf{R}). \tag{7.78}$$

Наоборот, интегрируя по координатам, мы можем выразить волновые функции Ψ и Ψ^* через их импульсные аналоги,

$$\begin{aligned}\int d^3R\, W(\mathbf{R},\mathbf{p}) = \int d^3R \int d^3r\, e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\times \\ \times \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{(i/\hbar)\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r}/2)}\Phi(\mathbf{p}')\times \\ \times \int \frac{d^3p''}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}''\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{r}/2)}\Phi^*(\mathbf{p}'').\end{aligned} \tag{7.79}$$

Выполняя интегрирование по $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$ и используя возникающие дельта-функции, получаем

$$\int d^3R\, W(\mathbf{R},\mathbf{p}) = |\Phi(\mathbf{p})|^2 \equiv n_{\mathbf{p}}. \tag{7.80}$$

Действительно, эти свойства распределения Вигнера аналогичны свойствам классической функции распределения (7.73), (7.74).

Принципиальная разница состоит в том, что классическая функция $f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ всегда положительна, и поэтому её можно интерпретировать как плотность вероятности в фазовом пространстве. Определение (7.77) показывает, что распределение Вигнера является вещественной функцией, $W(\mathbf{R},\mathbf{p})^* = W(\mathbf{R},\mathbf{p})$. Однако невозможно гарантировать, что функция Вигнера будет положительной. Нарушение положительности происходит как раз из-за квантовой интерференции.

Задача 7.6

Покажите, что для суперпозиции двух плоских волн,

$$\Psi(\mathbf{r}) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + Be^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})}, \tag{7.81}$$

с $\mathbf{k} \neq \mathbf{q}$ распределение Вигнера содержит осциллирующие слагаемые, которые пропорциональны $\delta(\mathbf{p} - (\hbar/2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}))AB\cos((\mathbf{k} - \mathbf{q})\cdot\mathbf{R})$ (при условии, что A и B вещественны).

7.5 Картина Гейзенберга

В предыдущей формулировке мы рассмотрели эволюцию вектора состояния $|\Psi(t)\rangle$, которая управляется гамильтонианом $\hat{H}$ согласно уравнению (7.4). Временна́я зависимость матричных элементов оператора $\hat{A}$ давалась с помощью уравнения (7.9). Этот язык квантовой динамики определяет *картину Шрёдингера*. Существуют альтернативные способы представления динамики. В *картине Гейзенберга* вектор состояния фиксирован таким, каким он был в исходном состоянии, а операторы изменяются со временем. Физические результаты идентичны в обеих картинах, хотя во многих приложениях картина Гейзенберга более похожа на классическую.

Произвольный матричный элемент (7.9) может быть выражен в терминах унитарного преобразования $\hat{U}(t)$ (см. уравнение (7.11)) начальных векторов состояния,

$$\langle\Psi_2(t)|\hat{A}|\Psi_1(t)\rangle = \langle\hat{U}\Psi_2(0)|\hat{A}|\hat{U}\Psi_1(0)\rangle = \langle\Psi_2(0)|\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}|\Psi_1(0)\rangle. \tag{7.82}$$

Это преобразование является ещё одним примером преобразования базиса (см. раздел 6.9), когда в новом базисе (в нашем случае взятом при $t = 0$) новые операторы имеют те же самые матричные элементы. Преобразованные операторы зависят от времени, даже когда исходные от него не зависят. Мы будем называть их *Гейзенберговскими операторами*,

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U} = e^{(i/\hbar)\hat{H}t}\hat{A}e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}. \tag{7.83}$$

Теперь динамику можно описать по-другому. Вектор состояния (в картине Гейзенберга) зафиксирован в исходной ситуации (циферблат часов), в то время как операторы (измерительные инструменты) движутся (как стрелки часов). Результат измерения точно такой же, как и в картине Шрёдингера, когда циферблат часов перемещается против часовой стрелки, а сами стрелки неподвижны. Отметим, что гамильтониан коммутирует

с оператором эволюции $\hat{U}$ и поэтому не изменяется,

$$\hat{H}_H(t) = \hat{H}. \tag{7.84}$$

Определение (7.83) позволяет вывести уравнение движения для операторов Гейзенберга прямым дифференцированием,

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \hat{U}^\dagger \left\{ -\hat{H}\hat{A} + i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \hat{A}\hat{H} \right\} \hat{U}. \tag{7.85}$$

Здесь среднее слагаемое учитывает возможную явную зависимость от времени исходного оператора $\hat{A}$. Таким образом, уравнение движения оператора выражается через *коммутатор* этого оператора с гамильтонианом системы,

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}]_H + i\hbar \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H. \tag{7.86}$$

Коммутатор с гамильтонианом, $[\hat{A}, \hat{H}]_H$, вычисляется непосредственно с операторами Шрёдингера, а затем обкладывается операторами эволюции. При вычислении полезно иметь в виду, что для любой пары операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$

$$[\hat{A}_H, \hat{B}_H] = [\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}, \hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{U}] = \hat{U}^{-1}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{U} = [\hat{A}, \hat{B}]_H, \tag{7.87}$$

т. е. коммутаторы всегда могут быть вычислены с операторами Шрёдингера и только затем преобразованы, что является следствием унитарности оператора преобразования $\hat{U}$.

7.6 Операторная динамика

В качестве важного примера рассмотрим стандартный гамильтониан (7.24) частицы массы m в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{r}}). \tag{7.88}$$

Уравнения движения операторов (7.86) могут быть легко получены с помощью простых методов раздела 4.3:

$$\dot{\hat{\mathbf{r}}}_H = \frac{\hat{\mathbf{p}}_H}{m}, \tag{7.89}$$

$$\dot{\hat{\mathbf{p}}}_H = \hat{\mathbf{F}}_H \equiv -\nabla U(\hat{\mathbf{r}}_H); \tag{7.90}$$

эти операторы не содержат явной зависимости от времени. Уравнения (7.89) и (7.90) имеют точно такой же вид, что и уравнения движения для динамических переменных классической механики.

Более того, в классической механике существует формализм, полностью аналогичный нашим коммутаторам [13, §42]. Классические уравнения Гамильтона для динамических переменных, координат $q_i(t)$ и сопряжённых импульсов $p_i(t)$ в системе, описываемой классической функцией Гамильтона $H(q,p)$, имеют вид

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \tag{7.91}$$

т. е. они очень похожи на квантовые коммутаторы (4.33). Для любой функции $A(q,p,t)$ полная эволюция во времени вдоль траектории может быть выражена через *скобку Пуассона* $\{A,H\}$ с гамильтонианом:

$$\dot{A} = \sum_i \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\dot{p}_i \right\} + \frac{\partial A}{\partial t} \equiv \{A,H\} + \frac{\partial A}{\partial t}. \tag{7.92}$$

Здесь скобками Пуассона, в силу уравнений Гамильтона (7.91), являются

$$\{A,H\} = \sum_i \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} \right\}. \tag{7.93}$$

Динамическое уравнение (7.92) аналогично квантовому уравнению (7.86). Мы можем определить скобки Пуассона для любой пары динамических переменных, которые могут быть выражены как функции координат и импульсов:

$$\{A,B\} = \sum_i \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \right\}, \tag{7.94}$$

и проверить, что все их алгебраические свойства совпадают с соответствующими свойствами (4.31) и (4.32) квантовых коммутаторов. Соответствие, как видно из (4.28) и (4.30), может быть установлено в виде

$$[\hat{A}, \hat{B}] \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar\{A, B\}. \tag{7.95}$$

Тем не менее квантовые уравнения записываются для *операторов*, и можно взять любые матричные элементы этих уравнений. Вычисляя средние значения (7.89) и (7.90) по любому состоянию $|\Psi\rangle$ (как мы помним, это начальное состояние $|\Psi(0)\rangle$, но при этом полученное среднее значение такое же, как если бы была взята волновая функция Шрёдингера $|\Psi(t)\rangle$ с не зависящими от времени операторами), мы приходим к *теоремам Эренфеста (1927)*:

$$\langle\dot{\hat{\mathbf{r}}}\rangle_t = \frac{\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle_t}{m}, \tag{7.96}$$

$$\langle\dot{\hat{\mathbf{p}}}\rangle_t = -\langle\nabla U(\hat{\mathbf{r}})\rangle_t. \tag{7.97}$$

Величина в левой части уравнения (7.96) представляет собой скорость центра тяжести волнового пакета; она связано с центром тяжести импульсного распределения в соответствии с нормальным классическим выражением. Уравнение (7.97) определяет ускорение центра тяжести через среднее значение силы. Но здесь картина может отличаться от классической.

Сила в уравнении (7.97) представляет собой *среднюю силу*, действующую на весь волновой пакет, а не силу, действующую на центр пакета. Траектория центра будет совпадать с классической, если эти силы совпадают. Есть три случая, когда усреднение по волновой функции приводит к тем же значением, что и для силы, действующей только на центр тяжести: (i) свободное движение, когда никакая сила не действует — центр тяжести находится в покое или движется с постоянной скоростью; (ii) линейный потенциал, например, для однородного поля, когда $F = \text{const}$ и, следовательно, классическое условие выполняется; (iii) *гармонический осциллятор*, когда потенциал создаётся линейной силой, например, в одномерном случае

$$U(\hat{x}) = \frac{1}{2}\kappa\hat{x}^2, \quad \hat{F} = -\kappa\hat{x}. \tag{7.98}$$

Во всех трёх случаях

$$\langle F(\hat{x})\rangle = F(\langle\hat{x}\rangle). \tag{7.99}$$

В других случаях уравнения Эренфеста не совпадают с уравнениями Ньютона. Разница между двумя сторонами уравнения (7.99) зависит от того, насколько сильно микроскопическая сила $F(\mathbf{r})$ изменяется в пределах размера волнового пакета. Если это изменение является плавным, мы можем использовать разложение

$$\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}) \approx \mathbf{F}(\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle) + \Big(\hat{\mathbf{r}} - \langle\hat{\mathbf{r}}\rangle\Big) \cdot \nabla\, \mathbf{F}(\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle) + \frac{1}{2}\Big(\hat{x}_i - \langle\hat{x}_i\rangle\Big)\Big(\hat{x}_j - \langle\hat{x}_j\rangle\Big)\frac{\partial^2\mathbf{F}(\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle)}{\partial x_i\,\partial x_j} + \cdots, \tag{7.100}$$

где все производные берутся в центре тяжести. При усреднении член с $(\hat{\mathbf{r}} - \langle\hat{\mathbf{r}}\rangle)$ исчезает:

$$\langle\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}})\rangle \approx \mathbf{F}(\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle) + \frac{1}{2}\left\langle\Big(\hat{x}_i - \langle\hat{x}_i\rangle\Big)\Big(\hat{x}_j - \langle\hat{x}_j\rangle\Big)\right\rangle\frac{\partial^2\mathbf{F}(\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle)}{\partial x_i\,\partial x_j} + \cdots. \tag{7.101}$$

Центр тяжести движется близко к классической траектории, если флуктуации силы в области волнового пакета малы. Шансы на это больше для пакетов малого размера, хотя частица не может быть локализована лучше, чем в пределах характерной длины волны λ. Таким образом, условие классического характера потенциального поля по отношению к частице с импульсом $p \sim \hbar/\lambda$ есть $\lambda^2 F/R^2 \ll F$, где R — характерный размер неоднородности поля, или

$$R^2 \gg \lambda^2, \quad \left(\frac{pR}{\hbar}\right)^2 \gg 1, \tag{7.102}$$

т. е. классическое действие на типичной длине, $\sim pR$, должно быть много больше, чем величина кванта действия $\hbar$. То же самое условие короткой длины волны, как известно, есть в геометрической оптике, когда волновыми явлениями дифракции можно пренебречь. В противном случае квантовые флуктуации существенны и понятие классической траектории не применимо.

Задача 7.7

Частица с зарядом e находится в постоянном однородном электрическом поле $\mathcal{E}$. Решить операторные уравнения движения и установить коммутационные соотношения между Гейзенберговскими операторами, взятыми в различные моменты времени.

Решение.

Сила равна $F = e\mathcal{E}$, и, как следует из (7.89), (7.90), центр тяжести ускоряется, как и в законе Ньютона,

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) + e\mathcal{E}t, \quad \hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}(0)}{m}\,t + \frac{1}{2}\,\frac{e\mathcal{E}}{m}\,t^2. \tag{7.103}$$

При этом операторы при $t = 0$ — это стандартные операторы Шрёдингера, не зависящие от времени. Хотя центр тяжести $\langle x(t)\rangle$ движется по классической траектории, наличие квантовых флуктуаций видно даже здесь: операторы координаты для различных моментов времени не коммутируют и поэтому имеют взаимную неопределённость:

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(t')] = \frac{i\hbar}{m}(t' - t), \quad (\Delta x)_t \cdot (\Delta x)_{t'} \geqslant \frac{\hbar|t' - t|}{2m}. \tag{7.104}$$

Однако эта неопределённость такая же, как в расплывании волнового пакета при свободном движении, поскольку оно не изменено присутствием поля. Вместе с тем операторы импульса коммутируют в любые моменты времени.

Задача 7.8

Тот же вопрос, что и в предыдущей задаче, но для потенциала линейного гармонического осциллятора (7.98).

Решение.

Уравнения движения линейны и могут быть точно решены, как и в классической механике:

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \cos(\omega t)\,\hat{x}(0) + \sin(\omega t)\,\frac{\hat{p}(0)}{m\omega}, \\ \hat{p}(t) &= \cos(\omega t)\,\hat{p}(0) - \sin(\omega t)\,m\omega\,\hat{x}(0), \end{aligned} \tag{7.105}$$

где частота осциллятора равна $\omega = \sqrt{\kappa/m}$. Коммутационные соотношения имеют периодическую зависимость от времени, например,

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(t')] = \frac{i\hbar}{m\omega}\,\sin(\omega(t' - t)). \tag{7.106}$$

7.7 Теорема вириала

Коммутационные соотношения бывают полезны для получения многих важных выводов. Начнём с напоминания результата классической механики: в любом состоянии *финитного* движения среднее по времени от полной производной по времени какой-то динамической переменной равно нулю. Среднее по времени, которое определяется как

$$\overline{A(t)} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt\, A(t), \tag{7.107}$$

равно нулю, если $A(t) = \dot{B}$, так как (7.107) сводится к $[B(T/2)-B(-T/2)]/T$ и все динамические переменные изменяются в этом состоянии в конечных интервалах, тогда как $T \to \infty$. Это утверждение также связано с понятием *равновесия* в статистической механике: величины «типа скорости» должны принимать равновероятные значения при «обратном» и «прямом» движении, если вся система ограничена в своём фазовом пространстве.

Квантовая механика приводит к аналогичному результату. Рассмотрим *стационарное* состояние дискретного спектра. Дискретный спектр возникает вследствие граничных условий и отвечает финитному движению, при котором вероятность нахождения системы на больших расстояниях экспоненциально мала. При усреднении по стационарному состоянию $|\Psi\rangle$ с энергией E операторные уравнения движения для величины без явной зависимости от времени дают

$$i\hbar\langle\Psi|\dot{\hat{A}}|\Psi\rangle = \langle\Psi|[\hat{A},\hat{H}]|\Psi\rangle = (E-E)\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = 0, \tag{7.108}$$

если среднее значение $\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$ не бесконечно. Это объясняет оговорку относительно дискретного спектра в квантовой механике или финитного движения в классическом случае. Заметим, что эта теорема, вместе с уравнениями (7.96) и (7.97), сразу говорит, что в любом стационарном состоянии дискретного спектра

$$\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = 0, \quad \langle\hat{\mathbf{F}}\rangle = 0. \tag{7.109}$$

Очевидно, это было бы неправильно в континууме, где даже для плоской волны среднее значение импульса не обращается в нуль (формально волновые функции в уравнении (7.108) не нормируемы).

Если взять в качестве нашего оператора $\hat{A} \Rightarrow (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})$, уравнение движения гласит

$$\frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) + (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{F}}). \tag{7.110}$$

Так как среднее значение левой части равно нулю для волновой функции дискретного спектра, мы приходим к *теореме вириала*, касающейся средней кинетической и потенциальной энергий в полной аналогии с такой теоремой в классической механике,

$$2\langle \hat{K} \rangle = \langle (\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla U) \rangle. \tag{7.111}$$

Этот результат особенно прост в случае, когда потенциал имеет вид степенной функции, $U \sim r^s$, где r — радиус в сферической системе координат или, в общем случае, если потенциал есть *однородная функция*,

$$U(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^s U(x, y, z), \tag{7.112}$$

с вещественным параметром s. Для $\lambda = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$, получаем

$$U + \varepsilon(\mathbf{r} \cdot \nabla)U = (1 + s\varepsilon)U \quad \rightsquigarrow \quad (\mathbf{r} \cdot \nabla)U = sU, \tag{7.113}$$

и теорема вириала (7.111) упрощается до выражения

$$\langle K \rangle = \frac{s}{2}\langle U \rangle, \quad E = \langle H \rangle = \langle K + U \rangle = \frac{2+s}{2}\langle U \rangle = \frac{s+2}{s}\langle K \rangle. \tag{7.114}$$

В кулоновском случае, $s = -1$, мы уже использовали это соотношение для круговых орбит в (1.22). Для гармонического осциллятора, $s = 2$, имеем $\langle K \rangle = \langle U \rangle$. Теорема в том же виде (7.114) справедлива для системы многих тел, когда закон подобия (7.112) имеет место для потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r}$ является расстоянием между взаимодействующими частицами.

7.8 Вероятность выживания

Начальное нестационарное состояние $|\Psi(0)\rangle$ развивается в соответствии с гамильтоновой динамикой (7.1). Для эрмитова гамильтониана $\hat{H}$ динамика унитарна и норма вектора состояния сохраняется. Тем не менее вектор «вращается» в гильбертовом пространстве и через некоторое время может стать совершенно отличным от исходного.

Во многих практических задачах важно знать *вероятность выживания*, т. е. долю исходного состояния, которая сохраняется в эволюционирующем векторе состояния $|\Psi(t)\rangle$:

$$P(t) = \Big|\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle\Big|^2. \tag{7.115}$$

Согласно (7.4) эта вероятность равна квадрату диагонального матричного элемента оператора эволюции в исходном состоянии:

$$P(t) = \Big|\langle\Psi(0)|e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle\Big|^2. \tag{7.116}$$

Как уже говорилось в разделе 5.8, распад нестабильного состояния, как правило, предполагается экспоненциальным, $P(t) \propto \exp(-\gamma t)$. Тем не менее как мы упоминали ранее, на начальном этапе эволюция отклоняется от экспоненциального закона. Мы можем оценить, что происходит вначале с помощью простого разложения точного выражения (7.116).

Такое разложение до членов второго порядка даёт

$$P(t) \approx \left|\left\langle\Psi(0)\middle|1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{1}{2}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\hat{H}^2t^2\middle|\Psi(0)\right\rangle\right|^2. \tag{7.117}$$

Здесь член нулевого порядка равен единице, члены $\propto t$ исчезают, в то время как члены $\propto t^2$ объединяются в неопределённость энергии $\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2 = (\Delta H)^2$ начального состояния,

$$\frac{t^2}{\hbar^2}\langle\Psi(0)|\hat{H}|\Psi(0)\rangle^2 - \frac{t^2}{\hbar^2}\langle\Psi(0)|\hat{H}^2|\Psi(0)\rangle = -\frac{t^2}{\hbar^2}(\Delta H)^2. \tag{7.118}$$

В результате при малых временах

$$P(t) = 1 - \frac{(\Delta H)^2t^2}{\hbar^2}. \tag{7.119}$$

Вероятность выживания падает медленнее, чем по экспоненте; характерное время этого этапа обратно пропорционально нопределённости энергии нестабильного состояния, $\tau \sim 1/(\Delta H)$.

Более сильный результат может быть получен [28] с помощью операторных уравнений движения (7.86). Соотношение неопределённостей в виде (6.162) может быть применено к производной по времени от Гейзен-

берговского оператора $\hat{A}$ (без явной зависимости от времени). Это даёт

$$(\Delta A)(\Delta H) \geqslant \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}\right|, \tag{7.120}$$

где все средние значения операторов Гейзенберга вычисляются по состоянию $|\Psi(0)\rangle$. Однако тот же самый результат должен получаться как среднее значение не зависящих от времени операторов Шрёдингера в состоянии $|\Psi(t)\rangle$ (теорема Эренфеста). Если мы возьмём проекционный оператор (6.124) для начального состояния

$$\hat{A} = |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|, \tag{7.121}$$

его зависящее от времени среднее значение как раз является нашей вероятностью выживания (7.115)

$$\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle = \left|\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle\right|^2 = P(t). \tag{7.122}$$

Так как проекционный оператор (7.121) удовлетворяет свойству (6.126), $\hat{A}^2 = \hat{A}$, его неопределённость может быть выражена как

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = \langle A\rangle - \langle A\rangle^2 = P(1-P). \tag{7.123}$$

Теперь неравенство (7.120), написанное справа налево, даёт

$$\left|\frac{dP}{dt}\right| \leqslant \frac{2(\Delta H)}{\hbar}\sqrt{P(1-P)}. \tag{7.124}$$

Легко видеть, что в начале процесса это неравенство превращается в равенство, совпадающее в линейном приближении, $\sim t$, с предыдущим результатом (7.119). Если мы напишем (7.124) в виде

$$\frac{1}{\sqrt{P(1-P)}} \leqslant \frac{2(\Delta H)}{\hbar}\left|\frac{dt}{dP}\right| \tag{7.125}$$

и проинтегрируем обе части от начального значения $P = 1$ до произвольного значения P, то получим

$$\int_1^P \frac{dP}{\sqrt{P(1-P)}} \leqslant \frac{2(\Delta H)}{\hbar}\,t \tag{7.126}$$

или, вычисляя интеграл с помощью замены $P = \cos^2\alpha$,

$$P(t) \geqslant \cos^2\left(\frac{(\Delta H)t}{\hbar}\right). \tag{7.127}$$

7.9 Правила сумм

Во многих случаях коммутационные соотношения позволяют получить ценную информацию о физических процессах в системе без явного решения динамической задачи.

Рассмотрим систему N нерелятивистских частиц, взаимодействующих посредством потенциальных сил V, которые зависят только от координат частиц $\mathbf{r}_a$, но не от скоростей или импульсов. Гамильтониан системы может также включать внешние потенциалы, $U_a(\mathbf{r}_a)$,

$$H = \sum_{a=1}^{N}\left[\frac{\mathbf{p}_a^2}{2m_a} + U_a(\mathbf{r}_a)\right] + V(\{\mathbf{r}_a\}). \tag{7.128}$$

Пусть $|n\rangle$ — полный набор стационарных многочастичных состояний с энергиями E_n и

$$Q = \sum_a q_a, \quad q_a = q(\mathbf{r}_a) - \tag{7.129}$$

произвольный оператор, зависящий от координат $\mathbf{r}_a$ отдельных частиц с массами m_a. Зафиксируем одно из многочастичных стационарных состояний $|i\rangle$ и назовём *энергетически-взвешенным правилом сумм* следующую сумму по всем состояниям $|n\rangle$:

$$S_i[Q] \equiv \frac{1}{2}\sum_n (E_n - E_i)\{|\langle n|Q|i\rangle|^2 + |\langle n|Q^\dagger|i\rangle|^2\}. \tag{7.130}$$

Такие величины суммируют энергетически-взвешенные интенсивности всех переходов из данного состояния $|i\rangle$ во все возможные состояния $|n\rangle$ (как вверх, так и вниз по энергии).

Для того чтобы вычислить сумму $S_i[Q]$, перепишем её с помощью коммутационных соотношений. После перегруппировки слагаемых в правой части уравнения (7.130) выразим энергетически-взвешенную сумму через

двойной коммутатор,

$$S_i[Q] = \frac{1}{2}\langle i| \left[[Q, H], Q^\dagger\right] |i\rangle. \tag{7.131}$$

Вычисление суммы требует знания среднего значения лишь для *начального состояния* $|i\rangle$, а не для всех промежуточных состояний $|n\rangle$.

Для не зависящего от импульса взаимодействия коммутатор включает только кинетическую часть гамильтониана и может быть найден в явном виде:

$$[Q, H] = \sum_{ab} \frac{1}{2m_b}[q_a, \mathbf{p}_b^2] = \sum_a \frac{i\hbar}{2m_a}[(\nabla_a q_a), \mathbf{p}_a]_+, \tag{7.132}$$

где $[..., ...]_+$ обозначает антикоммутатор (6.68) (конечно, переменные для различных частиц, $a \neq b$, коммутируют). Второй коммутатор сводит выражение (7.131) к

$$S_i[Q] = \sum_a \frac{\hbar^2}{2m_a}\langle i||\nabla_a q_a|^2|i\rangle. \tag{7.133}$$

В результате для всего энергетически-взвешенного правила сумм требуется только знание одного матричного элемента для начального состояния. Для *монопольного* оператора $q = \mathbf{r}^2$,

$$\nabla q = 2\mathbf{r}, \quad S_i\left[\sum r^2\right] = \sum_a \frac{2\hbar^2}{m_a}\langle i|r_a^2|i\rangle. \tag{7.134}$$

В системе N одинаковых частиц массы m это выражение пропорционально *среднему квадрату радиуса* $\langle R^2\rangle_i = (1/N)\sum_a \langle i|r_a^2|i\rangle$ в состоянии $|i\rangle$,

$$S_i\left[\sum r^2\right] = \frac{2\hbar^2}{m} N\langle R^2\rangle_i. \tag{7.135}$$

Задача 7.9

Получите энергетически-взвешенное правило сумм для *дипольного момента* системы зарядов e_a, $a = 1, ..., N$,

$$\mathbf{d} = \sum_a e_a \mathbf{r}_a. \tag{7.136}$$

В приложениях мы предполагаем, что центр масс системы находится в начале системы координат.

Решение.

Возьмём любую компоненту вектора $\mathbf{d}$. Дипольное правило сумм (7.133) является *универсальным* для всех состояний $|i\rangle$:

$$S_i[d_z] = \sum_a \frac{\hbar^2 e_a^2}{2m_a}. \tag{7.137}$$

В атоме система центра масс привязана к ядру, и правило сумм (7.137) для Z электронов (*правило сумм Томаса-Райхе-Куна (ТРК)*) для любого состояния $|i\rangle$ имеет вид,

$$S_i[d_z] = \frac{\hbar^2 e^2}{2m} Z. \tag{7.138}$$

Задача 7.10

Модифицируйте дипольное правило сумм для описания внутренних дипольных возбуждений в атомном ядре с Z протонами и N нейтронами (атомный номер $A = Z + N$).

Решение.

Предполагая одинаковыми массы M для протонов (p) и нейтронов (n) и вводя радиус центра масс (ц. м.) в произвольной системе отсчёта,

$$\mathbf{R} = \frac{1}{A}\sum_a \mathbf{r}_a = \frac{1}{A}\Big(\sum_p \mathbf{r}_p + \sum_n \mathbf{r}_n\Big), \tag{7.139}$$

получаем для дипольного оператора (7.136) по отношению к ц. м.

$$\mathbf{d} = e\sum_p(\mathbf{r}_p - \mathbf{R}) = e\Big[\sum_p \mathbf{r}_p - Z\mathbf{R}\Big] = e\left[\left(1 - \frac{Z}{A}\right)\sum_p \mathbf{r}_p - \frac{Z}{A}\sum_n \mathbf{r}_n\right]. \tag{7.140}$$

Таким образом, в системе ц. м. как протоны, так и нейтроны имеют *эффективные дипольные заряды*:

$$e_p = \frac{N}{A}\,e, \quad e_n = -\frac{Z}{A}\,e. \tag{7.141}$$

Это значит, что при наложении электрического поля и сохранении центра ядра в покое нужно сдвинуть протоны и нейтроны в противоположных направлениях. Правило сумм TRK (7.138) теперь принимает вид

$$S_i[d_z] = \frac{\hbar^2}{2M}\,(e_p^2 Z + e_n^2 N) = \frac{\hbar^2 e^2}{2M}\,\frac{NZ}{A}. \tag{7.142}$$

При этом, если добавить вклад ядра как целого (масса AM, заряд eZ), мы возвращаемся к результату TRK:

$$\frac{\hbar^2 e^2}{2M}\,\frac{NZ}{A} + \frac{\hbar^2 e^2}{2MA}\,\frac{Z^2}{A} = \frac{\hbar^2 e^2}{2M}\,Z. \tag{7.143}$$

Однако только часть (7.142) связана с внутренними возбуждениями ядра. Происхождение коэффициента NZ/A можно связать с приведённой массой движения нейтронов относительно протонов.

Задача 7.11

Оператор плотности вероятности для системы из многих одинаковых частиц может быть введён как обобщение уравнения (7.70)

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a). \tag{7.144}$$

Определите Фурье-компоненту оператора плотности

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = \int d^3r\, e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_a e^{-i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}_a)}. \tag{7.145}$$

Выведите энергетически-взвешенное правило сумм для оператора $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$.

Решение.

В этом случае мы снова получаем универсальное правило сумм, не зависящее от выбора состояния $|i\rangle$:

$$S_i[\rho_{\mathbf{k}}] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} N. \tag{7.146}$$

В *длинноволновом пределе*, $kr_a \ll 1$, это равносильно дипольному правилу сумм (7.138).

7.10 Законы сохранения

Операторы, которые не несут явной зависимости от времени и *коммутируют с гамильтонианом, сохраняются*:

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0, \quad \rightsquigarrow \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = 0. \tag{7.147}$$

Для операторов, которые имеют классические аналоги, законы сохранения совпадают с классическими и имеют те же физические основания. Так, в случае свободного движения, $\hat{H} = K(\hat{\mathbf{p}})$, импульс $\hat{\mathbf{p}}$ сохраняется:

$$\dot{\hat{\mathbf{p}}} = 0. \tag{7.148}$$

В любой замкнутой системе гамильтониан не содержит явной зависимости от времени и

$$\dot{\hat{H}} = 0, \tag{7.149}$$

что является утверждением о *сохранении энергии.*

Задача 7.12

Для частицы в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ найдите уравнение движения для орбитального момента (4.34) и условия сохранения орбитального момента.

Решение.

Уравнение движения с использованием коммутаторов (4.30) и (4.33) имеет вид

$$\dot{\hat{\ell}}_i = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\ell}_i, \hat{H}] = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_j \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_k, \hat{U}] = -\varepsilon_{ijk}\hat{x}_j \frac{\partial \hat{U}}{\partial \hat{x}_k} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{F}}]_i. \tag{7.150}$$

Как и в классической механике, изменение орбитального момента требует наличия *момента сил*

$$\hat{\mathbf{T}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{F}}]. \tag{7.151}$$

При выводе уравнения (7.150) коммутатор $\hat{\vec{\ell}}$ с *изотропной* кинетической энергией исчезает. Таким же образом коммутатор (7.150) обращается в нуль. Когда потенциал является изотропным, $\hat{U} = \hat{U}(r)$, сила направлена по радиусу и вращательный момент отсутствует. В общем случае орбитальный момент коммутирует с любой *скалярной функцией координат и импульсов.*

Во всех приведённых выше примерах основную роль в сохранении играет *симметрия.* Три основных классических закона сохранения — энергии, импульса и момента импульса — следуют из симметрии системы, её *инвариантности* относительно определённых глобальных преобразований. Эти три сохраняющиеся величины являются *генераторами непрерывных преобразований*, оставляющих систему (точнее её гамильтониан) инвариантным. Гамильтониан является генератором динамики, эволюции во времени (раздел 7.1), импульс — генератором пространственных сдвигов (раздел 4.5), а угловой момент — генератором вращения (раздел 4.7). Соответствующие законы сохранения имеют место для замкнутой системы, постоянного потенциала и инвариантного относительно вращений потенциала. Таким образом, все три преобразования — это преобразования симметрии, поэтому их генераторы сохраняется.

В общем случае пусть $\hat{U}$ — унитарное преобразование, оставляющее гамильтониан инвариантным. В соответствии с разделом 6.9 инвариантность можно записать в виде

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} = \hat{H}, \tag{7.152}$$

т. е. гамильтониан коммутирует с оператором преобразования $\hat{U}$:

$$\hat{U}\hat{H} = \hat{H}\hat{U}. \tag{7.153}$$

Для *непрерывного* преобразования, как в указанных трёх основных случаях, генератор преобразования $\hat{g}$ (см. (6.113)) *эрмитов* и равен $\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\vec{\ell}}$ соответственно. Следовательно, из $[\hat{U}, \hat{H}] = 0$ следует сохранение величины, соответствующей генератору преобразования $\hat{U}$. Для *дискретных* преобразований генераторы не существуют и само преобразование даёт интеграл движения. В следующей главе мы увидим примеры дискретных симметрий и соответствующие законы сохранения.

Стоит отметить, что закон сохранения не означает, что соответствующая величина имеет определённое значение. Средние значения таких величин действительно не зависят от времени, хотя состояние все ещё может быть суперпозицией различных собственных функций сохраняющегося

оператора. Подобно рассматривавшейся выше производной по времени от оператора (7.108) матричный элемент любого коммутатора $[\hat{A}, \hat{H}]$ между стационарными состояниями равен

$$\langle m|[\hat{A}, \hat{H}]|n\rangle = (E_n - E_m)\langle m|\hat{A}|n\rangle. \tag{7.154}$$

Для сохраняющейся величины, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, мы приходим к *правилу отбора*: ненулевые матричные элементы A_{mn} могут существовать только на *поверхности энергии* между состояниями с той же энергией, $E_m = E_n$. Однако, если собственное значение энергии E_n вырождено, имеется несколько таких состояний. При их классификации (см. раздел 6.13) с помощью квантовых чисел другой величины $\hat{B}$, которая не коммутирует с $\hat{A}$, эти состояния не имеют определённого значения $\hat{A}$, несмотря на закон сохранения. Сохранение всё же имеет место, так как любой матричный элемент оператора $\hat{A}$, в соответствии с уравнением (7.9), *не зависит от времени*, поскольку разрешённые для $\hat{A}$ частоты переходов ω_{mn} исчезают,

$$\langle \Psi_2(t)|\hat{A}|\Psi_1(t)\rangle = \sum_{mn} c_m^{(2)*} c_n^{(1)} A_{mn}. \tag{7.155}$$

В общем случае матричные элементы оператора между двумя стационарными состояниями с различными энергиями имеют чисто гармонические зависимости от времени, соответствующие частоте перехода между этими состояниями:

$$\langle \Psi_{E'}(t)|\hat{A}|\Psi_E(t)\rangle = \langle e^{-(i/\hbar)E't}\psi|\hat{A}|e^{-(i/\hbar)Et}\psi\rangle = e^{-(i/\hbar)(E-E')t}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle. \tag{7.156}$$

Типичным примером являются компоненты $\hat{\ell}_i$ углового момента. Все три сохраняются в системе, инвариантной относительно вращений, сохраняется также и сумма $\hat{\vec{\ell}}^2$ их квадратов. Если нет вырождения с состояниями, имеющими другие значения ℓ, эта сумма имеет определённое значение $\ell(\ell+1)$ (см. уравнение (5.90)). Тем не менее только одна из проекций ℓ_i может иметь определённое значение в этом состоянии, за исключением тривиального случая $\ell = 0$, когда все проекции исчезают. Ситуация, когда симметрия состояния *ниже*, чем симметрия гамильтониана, называется *спонтанным нарушением симметрии*. Система может иметь некоторое значение $\hat{\ell}_z$, хотя оси x и y физически эквивалентны. Это определяется историей приготовления системы. Однако симметрия *восстанавливается*, если есть возможность *вращения*, которое приводит систему без получе-

ния ею энергии к другой вырожденной ориентации. В отличие от этого, коммутирующие компоненты $\hat{\mathbf{p}}$ могут одновременно иметь определённые значения.

Не всегда легко установить взаимосвязь между свойствами симметрии системы и законами сохранения (есть также примеры «случайно» сохраняющихся величин, например, при специальных значениях параметров). Однако, как правило, такая взаимосвязь существует. В качестве последнего примера упомянем кулоновское поле, где, наряду с орбитальным моментом $\hat{\vec{\ell}}$, который сохраняется для любого изотропного потенциала, существует другой интеграл движения, так называемый *вектор Рунге-Ленца* [13, §15], который был фактически известен гораздо раньше *Лапласу*.

Задача 7.13

Докажите, что вектор

$$\hat{\mathbf{M}} = \frac{\hbar}{2m}\Big([\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\vec{\ell}}] - [\hat{\vec{\ell}} \times \hat{\mathbf{p}}]\Big) - \alpha\,\frac{\mathbf{r}}{r} \tag{7.157}$$

сохраняется в потенциале $U = \alpha/r$.

В классическом варианте $\hbar\vec{\ell}$ является моментом количества движения частицы, в то время как два члена в первом слагаемом (7.157) могут быть объединены в одно векторное произведение. Классический вектор $\mathbf{M}$ направлен вдоль главной оси эллипса; это указывает на ориентацию замкнутой траектории в плоскости вращения. Как и любой вектор, $\hat{\mathbf{M}}$ не коммутирует с орбитальным моментом (см. задачу 4.5):

$$[\hat{\ell}_i, \hat{M}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{M}_k. \tag{7.158}$$

Таким образом, он не имеет определённого значения в состоянии с определённым значением орбитального момента. Однако другая классификация – с определённым значением проекции $\mathbf{M}$ и неопределённым орбитальным моментом – так же возможна. Мы вернёмся к данному примеру при квантовом рассмотрении кулоновской задачи.

7.11 Формулировка с интегралом по траекториям

Существует эквивалентный подход к квантовой динамике на основе формализма *функционального интеграла* вместо операторов и уравнения Шрёдингера [29]. В нерелятивистской квантовой механике такой подход редко даёт лучшее решение проблем, но он становится мощным методом

в квантовой теории поля и задаче многих тел, особенно для получения результатов, выходящих за рамки теории возмущений (стандартный метод, основанный на разложении физических амплитуд по степеням силы взаимодействия, глава 4 том III). Здесь мы лишь проиллюстрируем метод интегрирования по путям на простом одномерном случае.

Эволюция квантового состояния определена, если мы найдем функцию Грина (пропагатор) (6.23), которую можно трактовать как амплитуду вероятности $\langle x,t|x',t'\rangle$ нахождения частицы в положении x в момент времени t, если она стартовала из локализованного состояния x' в момент времени $t' < t$. Начальное и конечное состояния являются собственными состояниями операторов Гейзенберга $\hat{x}(t')$ и $\hat{x}(t)$ с собственными значениями x' и x соответственно. Так, например,

$$\hat{x}(t)|x,t\rangle = e^{(i/\hbar)\hat{H}t}\hat{x}e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|x,t\rangle = x|x,t\rangle. \tag{7.159}$$

Состояние

$$e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|x,t\rangle = |x\rangle \tag{7.160}$$

является шрёдингеровским вектором состояния, локализованного в точке x при $t = 0$ и удовлетворяющего

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle. \tag{7.161}$$

Поэтому

$$|x,t\rangle = e^{(i/\hbar)\hat{H}t}|x\rangle \tag{7.162}$$

является решением уравнения (7.159). Так как момент $t = 0$ произволен, то мы можем записать

$$|x,t\rangle = e^{(i/\hbar)\hat{H}(t-t')}|x,t'\rangle. \tag{7.163}$$

Рассмотрим теперь развитие во времени состояния для бесконечно малого интервала времени от t до $t + \Delta t$. Пропагатор для этой эволюции имеет вид $\langle x,t+\Delta t|x',t\rangle$. Конечное состояние, согласно (7.163), равно

$$|x,t+\Delta t\rangle = e^{(i/\hbar)\hat{H}(\Delta t)}|x,t\rangle \tag{7.164}$$

и

$$\langle x, t+\Delta t | x', t\rangle = \langle x, t| e^{-(i/\hbar)\hat{H}(\Delta t)} | x', t\rangle. \tag{7.165}$$

Оператор $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p})$ фактически входит *линейно* в матричный элемент (7.165), так как Δt бесконечно мало. Поэтому мы всегда можем представить его в виде, когда все операторы $\hat{x}$ находятся слева от всех операторов $\hat{p}$; для наших стандартных гамильтонианов (7.24) эта проблема упорядочения не появляется. Поскольку гамильтониан в картине Гейзенберга тот же (см. уравнение (7.84)), мы можем отнести его к моменту t в бра-векторе и заменить оператор $\hat{x}$ его собственным значением x, так что вместо $H(\hat{x}, \hat{p})$ мы получим $H(x, \hat{p})$. Оставшаяся зависимость от $\hat{p}$ может быть рассмотрена аналогично, если мы сделаем преобразование к импульсному представлению $|p, t\rangle$,

$$|x', t\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle p, t | x', t\rangle |p, t\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-(i/\hbar)px'} |p, t\rangle. \tag{7.166}$$

Теперь действие операторов $\hat{p}$ в $\hat{H}$ на кет-вектор в (7.166) приводит к замене операторов на их собственные значения p, в то время как оставшееся скалярное произведение $\langle x, t|p, t\rangle$ — это просто сопряжённая плоская волна $\exp[(i/\hbar)px]$. В результате пропагатор (7.165) не содержит операторов и выражается в терминах классической функции $H(x, p)$:

$$\langle x, t+\Delta t | x', t\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-(i/\hbar)[H(x.p)(\Delta t) - (x-x')p]}. \tag{7.167}$$

Для того чтобы описать весь процесс конечной длительности от t до t', мы представляем этот интервал времени в виде последовательности $N+1$ фрагментов Δt, так что $t' = t_0$, $t_1 = t' + \Delta t$, ..., $t = t_{N+1} = t' + (N+1)\Delta t$. Согласно главному свойству (6.22) полный пропагатор равен интегралу по всем промежуточным точкам,

$$\langle x, t | x', t'\rangle = \int dx_1 ... dx_N \langle x, t | x_N, t_N\rangle \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1}\rangle \cdots \langle x_1, t_1 | x', t'\rangle. \tag{7.168}$$

Каждое промежуточное скалярное произведение даётся выражением вида (7.167), которое содержит полное интегрирование по импульсу. Пропагатор

для конечного времени становится равным

$$\langle x,t|x',t'\rangle = \int \prod_{n=1}^{N} \frac{dx_n\, dp_n}{2\pi\hbar}\, e^{(i/\hbar)S(\{x\},\{p\})} \equiv G(x,t;x',t'), \tag{7.169}$$

где мы снова используем обозначения (6.23), а функция S в экспоненте равна

$$S = \sum_{n}^{N+1} \left[(x_n - x_{n-1})p_{n-1} - H(x_n, p_{n-1})\Delta t\right]. \tag{7.170}$$

В пределе $N \to \infty$ и $\Delta t \to 0$ разность $x_n - x_{n-1}$ в уравнении (7.170) можно аппроксимировать с помощью производной $\dot{x}(t_n)\Delta t$ от интерполирующей функции $x(t_n)$, закреплённой на концах, $x(t') = x'$, $x(t) = x$. Результат сводится к

$$S = \sum_{n} [\dot{x}p - H(x,p)]_n \Delta t \to \int_{t'}^{t} d\tau [\dot{x}p - H(x,p)]_\tau. \tag{7.171}$$

Интегрирование по $dx_n\, dp_n$ в (7.169) теперь выполняется по *всем функциям* $x(\tau)$, $p(\tau)$ или по всем траекториям (*путям*) между (x', t') и (x, t), вклады которых *взвешиваются* пропорционально *интегралу действия* (7.171). Полная амплитуда выражается через интерференцию всех возможных путей:

$$\langle x,t|x',t'\rangle = \int \frac{Dx(\tau)\, Dp(\tau)}{2\pi\hbar}\, e^{(i/\hbar)\int_{t'}^{t} d\tau [\dot{x}p - H(x,p)]_\tau}, \tag{7.172}$$

где мы ввели символ D для функциональных дифференциалов.

7.12 Связь с классической механикой

В классической механике уравнения движения следуют из *принципа наименьшего действия* [13]. Система, описываемая координатами x (для простоты мы указываем лишь одну координату), характеризуется *функцией Лагранжа*, зависящей от координат и скоростей, $\mathcal{L}(x, \dot{x})$. Для нерелятивистской частицы массы m в потенциальном поле $U(x)$ функция Лагранжа

равна, в соответствии с экспериментом,

$$\mathcal{L}(x, \dot{x} = v) = K(v) - U(x) = \frac{mv^2}{2} - U(x). \tag{7.173}$$

Классическое действие вдоль траектории $x(\tau)$, которое соединяет данную начальную точку $x'(t')$ и конечную точку $x(t)$, задаётся интегралом действия

$$S[x(\tau)] = \int_{t'}^{t} d\tau\, \mathcal{L}(x(\tau), \dot{x}(\tau)). \tag{7.174}$$

Фактическая траектория, реализуемая в классической механике, является траекторией, которая соответствует экстремуму (минимуму для достаточно коротких траекторий) действия. Условие экстремума выполняется на траектории, которая определяется уравнениями *Эйлера-Лагранжа*,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}. \tag{7.175}$$

В простейшем случае (7.173) это приводит к *уравнению Ньютона*,

$$m\dot{v} = -\frac{\partial U}{\partial x} = F. \tag{7.176}$$

Функция Лагранжа связана с функцией Гамильтона согласно уравнению

$$H(x, p) = \dot{x}p - \mathcal{L}(x, v(p)), \tag{7.177}$$

а скорость $v = \dot{x}$ должна быть выражена как функция импульса согласно

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v}. \tag{7.178}$$

Хотя интеграл действия (7.171), в соответствии с (7.177), походит на классическое действие (7.174), на самом деле он отличается. В формуле (7.172) функции импульса $p(\tau)$ — это переменные интегрирования, не связанные с $x(\tau)$. Тем не менее мы действительно приходим к классическому действию в случае гамильтониана, который, как в (7.24) или (7.173), является полиномом второго порядка по импульсу. Тогда мы можем *проинтегрировать* по импульсным переменным $p(\tau)$, приведя экспоненту к полному квадрату. Для гамильтониана $H(x,p) = U(x) + p^2/2m$ квадратичная форма переходит в $-(p - m\dot{x})^2/2m + m\dot{x}^2/2$, а остающийся после интегрирования

член $m\dot{x}^2/2$ дополняет функцию $-U(x)$ до классического лагранжиана (7.173). Интегрирование распределения Гаусса по импульсам оставляет только функциональный интеграл по координате:

$$\langle x,t|x',t'\rangle = \mathcal{N}\int_{x'(t')}^{x(t)} Dx(\tau)e^{(i/\hbar)S[x(\tau)]} \tag{7.179}$$

со стандартным классическим действием вдоль траектории $x(\tau)$ с фиксированными концами (уравнение (7.174)). Нормировочный коэффициент $\mathcal{N}$ в (7.179) может быть рассчитан (он также включает фактор $1/(2\pi\hbar)$), но проще найти его с помощью прямого сравнения с уравнением Шрёдингера, как показано ниже.

Интегрирование по импульсным переменным в функциональном интеграле эквивалентно выбору точки *стационарной фазы*, где подынтегральное выражение (7.171) имеет экстремум,

$$\frac{\delta S[x(\tau),p(\tau)]}{\delta p(\tau)} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \dot{x} = \frac{\delta H}{\delta p}. \tag{7.180}$$

В простом случае (7.173) стационарная фаза соответствует $p = p_{class} = m\dot{x}$ в каждой точке. Таким образом, эта процедура (точная в случае распределения Гаусса) отбирает импульс, удовлетворяющий классическому уравнению Гамильтона (7.180), и поэтому вес бесчисленных траекторий, дающих вклад в интеграл, сводится к классическому действию по экстремальной траектории. Уникальная классическая траектория удовлетворяет принципу наименьшего действия, что приводит к уравнению Лагранжа.

Альтернативная формулировка квантовой механики (*Р. Фейнман* [30]) принимает интеграл по путям в качестве отправной точки. В ней предполагается [29], что все *виртуальные* траектории с заданными граничными условиями, которые не реализуются в классическом случае, дают вклад в полную квантовую *амплитуду* процесса. Вклад траектории определяется, как в оптике, согласно *принципу Гюйгенса*, её фазой, $S/\hbar$, равной классическому действию по этому пути в единицах $S/\hbar$ (мы подчеркивали ранее, что постоянная Планка, по существу, обеспечивает масштаб).

7.13 Возвращение к картине Шрёдингера

Теперь, немного изменив обозначения, мы отождествим физическую амплитуду вероятности $\langle x,t|x_0,t_0\rangle$ нахождения частицы в окрестности точки x в момент времени t при заданном начальном состоянии с волновой

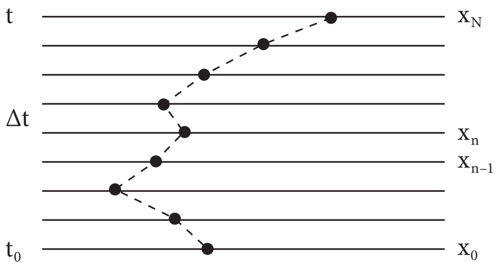

Рис. 7.3: Построение функционального интеграла

функцией

$$\langle x, t | x_0, t_0\rangle = \Psi(x, t; x_0, t_0), \tag{7.181}$$

и выведем квантово-механическое уравнение Шрёдингера, продемонстрировав тем самым эквивалентность двух формулировок.

Возвращаясь от символического определения интеграла по путям, придадим ему ясный операционный смысл. Разделим снова каждую траекторию $x(\tau)$ на очень большое число N небольших фрагментов длительностью $\Delta t = (t - t_0)/N$ и аппроксимируем траекторию в пределах n-го фрагмента, $n = 1, ..., N$, прямой линией между точками x_{n-1} и x_n (см. рис. 7.3).

На каждом малом шаге координата x может меняться во всей доступной области. В пределе $N \to \infty$, $\Delta t \to 0$ мы выполняем полный учёт всех возможных траекторий, так что функциональный интеграл становится обычным многомерным интегралом с предельным переходом к самому высокому разрешению и бесконечной размерности,

$$\Psi(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} \int \frac{dx_1 \dots dx_{N-1}}{\xi^N} e^{(i/\hbar)\sum_n^{N-1} S[x_{n+1}, x_n]}, \tag{7.182}$$

где каждый $\int dx_j$ охватывает всё пространство и нормирующий фактор ξ, введённый для каждого шага вместо фактора $\mathcal{N}$ в (7.179), должен зависеть от Δt, чтобы обеспечить существование независимого предела.

Если мы пойдём от $x = x_N$ на один шаг дальше от t до $t + \Delta t$, то получим

$$\Psi(x_{N+1}, t + \Delta t) = \int \frac{dx_1 \dots dx_N}{\xi^{N+1}} e^{(i/\hbar)\sum_n^{N} S[x_{n+1}, x_n]}. \tag{7.183}$$

Здесь мы приобрели дополнительное интегрирование по dx_N/ξ и соответствующий дополнительный член в экспоненте. Эта новая фаза не содержит

координат, относящихся к предыдущим моментам $n < N$. Предыдущие координаты могут быть *отинтегрированы*. Это определяет амплитуду $\Psi(x_N, t)$, и мы получаем рекуррентное соотношение

$$\Psi(x_{N+1}, t + \Delta t) = \int \frac{dx_N}{\xi} e^{(i/\hbar)S[x_{N+1},x_N]}\, \Psi(x_N, t). \tag{7.184}$$

Уравнение (7.184) справедливо в *первом порядке* по Δt. Мы должны последовательно пренебречь всеми членами второго и более высоких порядков по Δt. Если мы делаем ошибку порядка $(\Delta t)^2$ в каждом из $N =$ (интервал времени $T)/\Delta t$ фрагментов, суммарная погрешность не будет превышать величины

$$(\Delta t)^2 N \sim (\Delta t)^2 \, \frac{T}{\Delta t} \sim T\Delta t, \tag{7.185}$$

которая исчезает в пределе $\Delta t \to 0$ при конечном T. Будем считать, что основной вклад в интеграл в пределе $\Delta t \to 0$ происходит от путей с $|x_{N+1} - x_N| \propto \sqrt{\Delta t}$, как в процессе диффузии. Позже мы подтвердим это предположение. На таких малых расстояниях потенциал $U(x)$ не изменяется, и скорость можно аппроксимировать как $(x_{N+1} - x_N)/\Delta t$, так что вклад в фазу от функции Лагранжа (7.173) на небольшом интервале равен

$$S[x_{N+1}, x_N] = \int_t^{t+\Delta t} dt' \, \mathcal{L} \approx \Delta t \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{N+1} - x_N}{\Delta t} \right)^2 - U(x_{N+1}) \right\}. \tag{7.186}$$

После упрощения обозначений $x_{N+1} = x$, $x_N = x - \eta$ уравнение (7.184) примет вид

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \int \frac{d\eta}{\xi} e^{(i/\hbar)(m/2\Delta t)\eta^2} \, e^{-(i/\hbar)U(x)\Delta t} \Psi(x - \eta, t), \tag{7.187}$$

где должен быть выполнен предельный переход $\Delta t \to 0$. В этом пределе первая экспонента под знаком интеграла при конечных η очень сильно осциллирует, в то время как амплитуда Ψ, как предполагается, конечна. Это приводит к сильным сокращениям, за исключением узкой области значений $\eta \sim \sqrt{\hbar\Delta t/m}$ в соответствии со сделанным выше предположением. В этой оценке мы узнаём наши старые результаты для квантового расплывания волнового пакета (см. раздел 5.5). Для малых Δt мы можем разложить

волновую функцию под знаком интеграла согласно

$$\Psi(x-\eta,t) \approx \Psi(x,t) - \eta\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2}\,\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{7.188}$$

и распространить интегрирование по η до $\pm\infty$, поскольку только узкая область вблизи $\eta = 0$ даёт заметный вклад. Нечётный по η член с первой производной по Ψ исчезает при интегрировании в симметричных пределах, в то время как интегралы от гауссовских функций дают

$$\begin{aligned} \int d\eta\, e^{(im/2\hbar\Delta t)\eta^2} &= \sqrt{2\pi i\frac{\hbar\Delta t}{m}}, \\ \int d\eta\, \eta^2 e^{(im/2\hbar\Delta t)\eta^2} &= \frac{i\hbar\Delta t}{m}\sqrt{2\pi i\frac{\hbar\Delta t}{m}}. \end{aligned} \tag{7.189}$$

Следующий (кубический) член разложения (7.188) снова обращается в нуль из-за чётности, в то время как член $\sim \eta^4$ дал бы результат с дополнительным фактором Δt по сравнению с (7.189).

Аналогичным образом разложим левую часть (7.187):

$$\Psi(x,t+\Delta t) \approx \Psi(x,t) + \Delta t\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}. \tag{7.190}$$

С той же точностью экспоненту в (7.187) можно представить как

$$e^{-(i/\hbar)U(x)\Delta t} \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\,U(x)\Delta t. \tag{7.191}$$

Теперь мы должны сравнить члены низшего порядка в разложении (7.188). Они согласуются, если нормировочный коэффициент выбрать согласно

$$\xi = \sqrt{2\pi i\,\frac{\hbar\Delta t}{m}}, \tag{7.192}$$

(сравните с пропагатором (5.29)). После этого коэффициенты первого порядка по Δt дают правильное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\Psi(x,t) + U(x)\Psi(x,t). \tag{7.193}$$

Используя предельный переход $\Delta t \to 0$, мы свели оценку континуального интеграла к решению дифференциального уравнения. Метод интеграла по траекториям, который мы не используем в данном курсе, способен сформулировать все понятия квантовой механики, включая операторы, уравнения движения и коммутационные соотношения. Но он особенно полезен в квантовой теории поля [31].

7.14 Квантовая эволюция и ортогонализация

Эксперты в квантовой информатике утверждают, что работа квантового компьютера состоит из преобразований через взаимно ортогональные квантовые состояния. Тогда минимальное время, необходимое для такого преобразования, определяет производительность компьютера. Очевидно, что *одиночное* стационарное состояние $|\Psi_E(t)\rangle$ с энергией E будет эволюционировать, приобретая зависящую от времени фазу $\exp[(-i/\hbar)Et]$, и никогда не станет ортогональным к начальному состоянию $|\Psi(0)\rangle$.

Перекрытие между начальным и конечным состояниями есть

$$S(t) = \langle\Psi(t)|\Psi(0)\rangle, \tag{7.194}$$

так что вероятность выживания (7.115) равна $P(t) = |S(t)|^2$. Мы хотим определить момент времени (если это вообще случится), когда $S(t) = 0$. Поскольку перекрытие является в общем случае комплексным числом, то нужно удовлетворить двум условиям, $\mathrm{Re}\, S(t) = \mathrm{Im}\, S(t) = 0$. Для любой начальной суперпозиции ортонормированных стационарных состояний $|n\rangle$ с энергиями E_n,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{n=0} C_n|n\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0} C_n e^{-(i/\hbar)E_n t}|n\rangle, \quad \sum_{n=0} |C_n|^2 = 1, \tag{7.195}$$

перекрытие равно

$$S(t) = \sum_{nn'} C_n^* e^{(i/\hbar)E_n t} C_{n'} \langle n|n'\rangle = \sum_n |C_n|^2 e^{(i/\hbar)E_n t}. \tag{7.196}$$

Задача 7.14

а) В качестве начального состояния возьмите суперпозицию двух нормированных стационарных состояний с энергиями E_0, которая может быть принята за начало отсчёта энергий, $E_0 = 0$, и $E_1 > 0$. Найдите такую су-

перпозицию этих состояний, которая эволюционирует в ортогональную комбинацию, и определите минимальное время, необходимое для этого.

б) Постройте состояние в виде суперпозиции (с равными весами) трёх нормированных стационарных состояний с энергиями $E_0 = 0$, $E_1 > 0$, и $E_2 > E_1$. Найдите набор энергий, который будет гарантировать эволюцию к ортогональному состоянию, и определите минимальное время, необходимое для этого.

Решение.

а) В этом случае, определив $\alpha = |C_1|^2/|C_0|^2$, имеем

$$S(t) = |C_0|^2 \left(1 + \alpha e^{(i/\hbar)E_1 t}\right). \tag{7.197}$$

Ортогональность требует

$$\sin\left(\frac{E_1 t}{\hbar}\right) = 0, \quad 1 + \alpha\cos\left(\frac{E_1 t}{\hbar}\right) = 0. \tag{7.198}$$

Первое условие (7.198) из мнимой части перекрытия удовлетворяется периодически, и минимальное время равно

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{E_1}. \tag{7.199}$$

Второе условие (7.198) из действительной части перекрытия, будучи взятым в тот же момент времени $t = \tau$, даёт $\alpha = 1$. Это значит, что для достижения ортогональности, амплитуды C_0 и C_1 начальной суперпозиции должны быть равны по абсолютной величине, т. е. $1/\sqrt{2}$, так что они могут отличаться только на постоянную фазу, например,

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \tag{7.200}$$

тогда

$$|\Psi(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \tag{7.201}$$

Определим величину среднего значения энергии, которая остаётся постоянной во время эволюции:

$$\langle E\rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n. \tag{7.202}$$

В нашем случае равных весов вкладов в суперпозицию, $\langle E\rangle = (0 + E_1)/2 = E_1/2$, так что минимальное время ортогонализации (7.199) равно

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{2\langle E\rangle}. \tag{7.203}$$

б) В этом случае все три веса равны 1/3,

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle). \tag{7.204}$$

Зависящее от времени состояние даётся выражением

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|0\rangle + e^{-(i/\hbar)E_1(t)}|1\rangle + e^{-(i/\hbar)E_2(t)}|2\rangle\right). \tag{7.205}$$

Для перекрытия (7.194) мы находим

$$S(t) = \frac{1}{3}\left(1 + e^{(i/\hbar)E_1 t} + e^{(i/\hbar)E_2 t}\right). \tag{7.206}$$

Эта сумма трёх комплексных векторов должна давать ноль при достижении ортогонального состояния. В комплексной плоскости три вектора при этом условии должны образовать замкнутую петлю, что возможно только при определённом выборе энергий. Простейшим выбором является (вспомните группу симметрии трёхатомной молекулы (*задача 4.6*))

$$E_1 t = \frac{2\pi\hbar}{3}, \quad E_2 t = \frac{4\pi\hbar}{3}. \tag{7.207}$$

Общее решение получается добавлением целого числа поворотов на 2π в комплексной плоскости,

$$\frac{E_1}{E_2} = \frac{(2\pi/3) + 2\pi m_1}{(4\pi/3) + 2\pi m_2} = \frac{1 + 3m_1}{2 + 3m_2}, \tag{7.208}$$

где m_1 и m_2 — неотрицательные целые числа. Выбор (7.207) отвечает $m_1 = m_2 = 0$, тогда $E_2/E_1 = 2$. Минимальное время ортогонализации, согласно (7.207), равно в этом случае

$$\tau = \frac{2\pi\hbar}{3E_1}, \tag{7.209}$$

что, подобно (7.203), может быть записано в терминах среднего значения энергии начального состояния:

$$\langle E\rangle = \frac{0+E_1+2E_1}{3} = E_1, \quad \tau = \frac{2\pi\hbar}{3\langle E\rangle}. \tag{7.210}$$

Выбирая $m_1 = m_2 = 1$ в (7.208), мы получаем $E_2 = (5/4)E_1$ и $\tau = (2\pi\hbar)/\langle E\rangle$. Для n эквидистантных компонент, $E_n = nE_1$, одинаково входящих в суперпозицию, минимальное время ортогонализации равно $\tau = 2\pi\hbar/nE_1$. В этом случае система имеет период полной эволюции $T = 2\pi\hbar/E_1$, и за этот период система проходит через $(n-1)$ различных ортогональных состояний с интервалами времени $\Delta t = \tau$. Как выразился один автор, «это состояние ведёт себя замечательно и выглядит как стандарт времени, который тикает равномерно и циклично».

Минимальное время ортогонализации для любого начального состояния удовлетворяет неравенству, которое может быть получено следующим образом. Для произвольной начальной линейной комбинации типа (7.195), где мы всегда будем полагать энергию нижнего состояния $E_0 = 0$, перекрытие даётся уравнением (7.196). Тогда

$$\operatorname{Re} S(t) = \sum_n |C_n|^2 \cos\left(\frac{E_n t}{\hbar}\right), \quad \operatorname{Im} S(t) = \sum_n |C_n|^2 \sin\left(\frac{E_n t}{\hbar}\right). \tag{7.211}$$

Теперь, как было предложено в [32], мы можем использовать тригонометрическое неравенство

$$\cos x \geqslant 1 - \frac{2}{\pi}(x + \sin x). \tag{7.212}$$

Его справедливость легко проверить, изобразив графики обеих частей неравенства. Равенство достигается только при $x = 0$ и $x = \pi$. С помощью неравенства (7.212) в первой части равенства (7.211) находим

$$\operatorname{Re} S(t) \geqslant \sum_n |C_n|^2 \left\{1 - \frac{2}{\pi}\left[\frac{E_n t}{\hbar} + \sin\left(\frac{E_n t}{\hbar}\right)\right]\right\}. \tag{7.213}$$

Используя нормировку волновой функции и определение (7.202) среднего значения энергии $\langle E\rangle$, можно переписать выражение (7.213) следующим

образом:

$$\operatorname{Re} S(t) \geqslant 1 - \frac{2\langle E\rangle t}{\pi\hbar} - \frac{2}{\pi}\operatorname{Im} S(t). \tag{7.214}$$

Если состояние эволюционирует к ортогональному по отношению к начальному состоянию, то и действительная, и мнимая части перекрытия должны исчезать. Это значит, что время ортогонализации τ удовлетворяет неравенству

$$0 \geqslant 1 - \frac{2\langle E\rangle \tau}{\pi\hbar} \quad \rightsquigarrow \quad \tau \geqslant \frac{\pi\hbar}{2\langle E\rangle}. \tag{7.215}$$

Это неравенство выполняется в примерах *задачи 7.14*. Оно превращается в равенство только для случая двух состояний, смешанных с равными весами (см. (7.203)).

Много лет назад Л. Мандельштамм и И. Тамм [33] получили похожее неравенство из соотношений неопределённости:

$$\tau \geqslant \frac{\pi\hbar}{2\langle \Delta E\rangle}. \tag{7.216}$$

Здесь в знаменателе стоит неопределённость энергии в начальном состоянии (эта величина очевидно не зависит от времени). Это неравенство менее ограничивающее, так как можно сделать $\langle \Delta E\rangle$ очень большим, сохраняя $\langle E\rangle$ конечным. Специалисты по квантовым компьютерам иногда утверждают, что существование минимального времени ортогонализации означает существование максимальной скорости, $\nu = 1/\tau$, переработки квантовой информации при данном количестве энергии $\langle E\rangle$, введённой в компьютер.

Дополнительная литература: [29, 30, 34–37].

С момента появления физики соображения симметрии всегда давали нам необычайно мощный и полезный инструмент для познания природы. Постепенно они стали основой теоретических формулировок физических законов.

Ли Цзун-дао, «Физика частиц и введение в теорию поля»

Глава 8

Дискретные симметрии

8.1 Инвариантность относительно обращения времени

В соответствии с разделом 7.10 преобразования симметрии, оставляющие гамильтониан инвариантным, приводят к законам сохранения. Для дискретных симметрий унитарный оператор преобразования $\hat{U} = \exp(i\hat{G})$ коммутирует с гамильтонианом (см. уравнение (7.153)) и эрмитова наблюдаемая G сохраняется. Операция обращения времени $\mathcal{T}$ является исключением, так как она *не приводит к закону сохранения.* Тем не менее её следствия для квантовых систем незаменимы.

В *классической механике* уравнения движения в постоянном потенциальном поле *инвариантны относительно обращения времени.* Это утверждение надо понимать следующим образом. Для решения классических уравнений требуются начальные условия — мы задаём значения координат $q(0)$ и импульсов $p(0)$, которые берутся в некоторый начальный момент, например, при $t = 0$. В результате решения уравнений до момента времени $t > 0$ мы определяем траекторию в фазовом пространстве $q(t), p(t)$. Система является обратимой во времени, если для любого «прямого» решения мы можем найти «обратное» решение, начинающееся в конечной точке траектории с *обращёнными конечными скоростями* и проходящее весь путь обратно в исходную точку через все промежуточные точки за то же время (см. рис. 8.1).

Классический гамильтониан $H(q,p)$ замкнутой системы является $\mathcal{T}$-*инвариантным*, если $H(q,p) = H(q,-p)$. Это тот пункт, где координаты и импульсы, которые появляются на равной основе в гамильтоновом формализме, различаются. В классической механике это различие несущественно (напомним, однако, аргументы, используемые для состояний финитного движения в разделе 7.7).

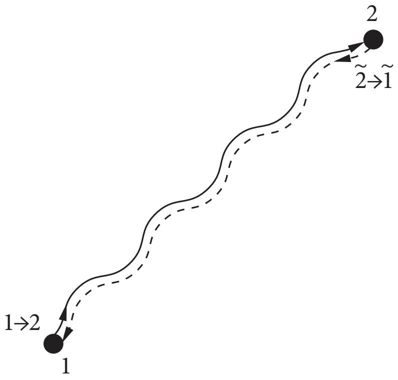

Рис. 8.1: Прямые и обратные траектории

$\mathcal{T}$-инвариантность нарушается во *внешнем магнитном поле*. Благодаря *силе Лоренца*, магнитное поле различает два противоположных направления скорости. Разница между постоянными электрическим и магнитным полями связана с их происхождением: электрические поля генерируются зарядами, тогда как магнитные поля создаются токами, которые обусловлены движением зарядов в определённом направлении. Если мы включим источник магнитного поля как часть нашей системы, расширенная система снова будет $\mathcal{T}$-инвариантной, так как обращение времени подразумевает, что все движения в системе должны быть обращены. Обратный ток будет создавать обращённое магнитное поле и вызовет обратное движение в системе, восстанавливая $\mathcal{T}$-инвариантность всего большого комплекса. Те же рассуждения применимы к вращающейся системе, в которой угловая скорость действует подобно магнитному полю.

Нерелятивистская *квантовая механика* позволяет сформулировать обращение времени близким к классической механике образом, но форма результата зависит от представления. Рассмотрим уравнение Шрёдингера для волновой функции $\Psi(t)$ в некотором представлении (число переменных волновой функции произвольно):

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(t). \tag{8.1}$$

Предполагая, что система замкнута, $\partial\hat{H}/\partial t = 0$, выполним формальное обращение времени, $t \to -t$:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi(-t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(-t). \tag{8.2}$$

Чтобы привести это уравнение обратно к виду (8.1), сделаем комплексное сопряжение, после чего получим

$$i\hbar\frac{\partial\Psi^*(-t)}{\partial t} = \hat{H}^*\Psi^*(-t). \tag{8.3}$$

Таким образом, *обращённая во времени* функция

$$\widetilde{\Psi}(t) = \Psi^*(-t) \tag{8.4}$$

удовлетворяет уравнению Шрёдингера с обращённым во времени гамильтонианом

$$\tilde{\hat{H}} = \hat{H}^*. \tag{8.5}$$

Замена $\Psi \to \widetilde{\Psi}$, $\hat{H} \to \tilde{\hat{H}}$ описывает обращение времени в квантовой механике. Здесь комплексное сопряжение по смыслу похоже на обращение траекторий в классическом случае, для плоской волны $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$ оно эквивалентно замене $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$. Матричные элементы гамильтониана,

$$H_{12} = \langle\Psi_1(t)|\hat{H}|\Psi_2(t)\rangle \equiv \int d\tau\,\Psi_1^*(t)\hat{H}\Psi_2(t), \tag{8.6}$$

где Ψ-функции и оператор $\hat{H}$, взятые в выбранном представлении с элементом объёма $d\tau$, преобразуются в

$$\widetilde{H}_{12} = \int d\tau\,\Psi_1(-t)\hat{H}^*\Psi_2^*(-t) = \int d\tau\,\Big(\hat{H}\Psi_2(-t)\Big)^*\Psi_1(-t) \tag{8.7}$$

или, используя эрмитовость (6.62) гамильтониана $\hat{H}$,

$$\widetilde{H}_{12} = \int d\tau\,\Psi_2^*(-t)\hat{H}\Psi_1(-t). \tag{8.8}$$

Мы видим, что в преобразованном матричном элементе $\widetilde{H}_{12}$ изменились не только направление во времени, но и роли «начального» Ψ_2 и «конечного»

Ψ_1 состояний поменялись местами по сравнению с первоначальным матричным элементом H_{12} в соответствии с идеей замены между собой начала и конца процесса.

Преобразованный гамильтониан (8.5) совпадает с исходным, если он вещественный. Тогда мы говорим, что система $\mathcal{T}$-инвариантна и обе функции, $\Psi(t)$ и $\widetilde{\Psi}(t)$ (см. уравнение (8.4)), являются решениями *того же* уравнения Шрёдингера. Для стационарного состояния,

$$\Psi(t) = e^{-(i/\hbar)Et}\psi, \quad \widetilde{\Psi}(t) = e^{(i/\hbar)E(-t)}\psi^*, \tag{8.9}$$

ψ и ψ^* удовлетворяют стационарному уравнению Шрёдингера с одной и той же вещественной энергией E. Если это собственное значение невырожденно, т. е. только одно независимое решение с этим значением E, и ψ и ψ^* совпадают с точностью до величины несущественной фазы. Если же собственное значение энергии вырождено, то ψ и ψ^* могут быть независимыми и мы можем взять их комбинации $\mathrm{Re}(\psi)$ и $\mathrm{Im}(\psi)$ в качестве новых функций с тем же значением энергии. Таким образом, в случае $\mathcal{T}$-инвариантности стационарные волновые функции базиса могут быть выбраны *вещественными*.

8.2 Преобразование операторов при обращении времени

Обращение времени — это не обычное унитарное преобразование, так как оно включает в себя комплексное сопряжение $\hat{\mathcal{K}}$ (уравнение (8.4)). Его действие на суперпозицию состояний не является линейным в смысле определения (6.46)), так как оно изменяет коэффициенты суперпозиции на их комплексно сопряжённые (такие преобразования иногда называют *антилинейными*). Мы можем определить операцию обращения времени как

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{U}_T \hat{\mathcal{K}} \hat{O}_t, \tag{8.10}$$

где $\hat{O}_t$ меняет $t \to -t$ в явной зависимости от времени, $\hat{\mathcal{K}}$ является операцией комплексного сопряжения и $\hat{U}_T$ — дополнительный унитарный оператор, который необходим для обеспечения правильного поведения физических наблюдаемых при обращении времени.

Оператор $\hat{U}_T$ зависит от представления. Преобразование подобия (6.101) определяет обращённый во времени оператор

$$\hat{\widetilde{A}} = \hat{\mathcal{T}} \hat{A} \hat{\mathcal{T}}^{-1}. \tag{8.11}$$

С другой стороны, во многих случаях мы знаем результат обращения времени из нашего классического опыта (на основе принципа соответствия). Оператор координаты не меняется, в то время как импульс должен изменить свой знак:

$$\hat{\tilde{\mathbf{r}}} = \hat{\mathbf{r}}, \quad \hat{\tilde{\mathbf{p}}} = -\hat{\mathbf{p}}. \tag{8.12}$$

Используя координатное представление (7.17), мы видим, что желаемый результат достигается без добавления специального унитарного оператора в уравнении (8.10); достаточно выполнить комплексное сопряжение:

$$\hat{\tilde{\mathbf{p}}} = \hat{\mathcal{K}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{K}}^{-1} = \hat{\mathbf{p}}^* = (-i\hbar\nabla)^* = i\hbar\nabla = -\hat{\mathbf{p}}. \tag{8.13}$$

Орбитальный момент также меняет знак:

$$\hat{\tilde{\vec{\ell}}} = \frac{1}{\hbar}\hat{\mathcal{K}}[\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]\hat{\mathcal{K}}^{-1} = -\hat{\vec{\ell}}. \tag{8.14}$$

Тем не менее дополнительная унитарная операция необходима, когда участвуют неклассические степени свободы. Компоненты спина, являясь частью полного углового момента, должны изменить свои знаки при обращении времени аналогично компонентам орбитального момента. Поэтому требуется определение обращения времени $\hat{\mathcal{T}}$ с дополнительными унитарными операторами, действующими в спиновом пространстве (см. раздел 5.5 из II тома).

Суммируя изложенное выше, можно сказать, что вектор состояния $\widetilde{\Psi}$, полученный из исходного вектора Ψ с помощью операции $\hat{\mathcal{T}}$, описывает *конечное* состояние, в котором обращены все характеристики типа скорости: если в состоянии Ψ они были $\mathbf{p}$ и $\mathbf{J}$, в состоянии $\widetilde{\Psi}$ все импульсы и угловые моменты становятся $\widetilde{\mathbf{p}} = -\mathbf{p}$ и $\widetilde{\mathbf{J}} = -\mathbf{J}$ соответственно. Если процесс $i \to f$ развивается в соответствии с уравнением Шрёдингера,

$$|\Psi_f\rangle = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}|\Psi_i\rangle, \tag{8.15}$$

то в обратном по времени процессе $\tilde{f} \to \tilde{i}$,

$$|\widetilde{\Psi}_i\rangle = e^{-(i/\hbar)\hat{\tilde{H}}t}|\widetilde{\Psi}_f\rangle. \tag{8.16}$$

Инвариантность относительно обращения времени (*обратимость* квантовой механики) означает, что $\hat{\tilde{H}} = \hat{H}$, так что для каждого прямого процесса

(8.15) существует обратный процесс (8.16), который развивается по тем же законам. В настоящее время мы знаем, что $\mathcal{T}$-инвариантность нарушается в природе. Но это слабое нарушение наблюдалось только в специфических процессах распада нейтральных K- и B-мезонов [38].

8.3 Инверсия и чётность

Операция $\hat{\mathcal{P}}$ *пространственной инверсии* — это другая дискретная симметрия гамильтониана, имеющая важное значение для поиска и классификации стационарных состояний. Операция $\hat{\mathcal{P}}$ меняет знак пространственных координат таким образом, что локализованное состояние частицы $|\mathbf{r}\rangle$ преобразуется согласно

$$|\mathbf{r}\rangle \Rightarrow \hat{\mathcal{P}}|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle. \tag{8.17}$$

В координатном представлении для произвольного состояния $|\psi\rangle$ имеем

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}|\hat{\mathcal{P}}|\psi\rangle &= \int d^3x\,\langle\mathbf{r}|\hat{\mathcal{P}}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \int d^3x\,\langle\mathbf{r}|-\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \\ &= \int d^3x\,\delta(\mathbf{r}+\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{r}).\end{aligned} \tag{8.18}$$

Таким образом, действие оператора инверсии на координатную волновую функцию просто есть

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \tag{8.19}$$

При применении операции пространственной инверсии к плоской волне $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp[(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})]$ она, как и ожидалось, эквивалентна изменению направления движения, $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$.

Легко проверить, что оператор инверсии является *линейным*, в отличие от оператора обращения времени. Оператор $\hat{\mathcal{P}}$ эрмитов и удовлетворяет очевидному геометрическому соотношению

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = 1, \tag{8.20}$$

которое показывает, что $\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^{-1}$, и, следовательно, эрмитов оператор $\hat{\mathcal{P}}$ также является унитарным. Этот оператор имеет только два собственных значения $\Pi = \pm 1$. Эти собственные значения определяют квантовое число

чётность, которое различает *чётные* функции,

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}), \quad \Pi = +1, \tag{8.21}$$

и *нечётные* функции,

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r}), \quad \Pi = -1. \tag{8.22}$$

Любая функция может быть однозначно представлена как суперпозиция собственных функций с определенной чётностью,

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\text{even}}(\mathbf{r}) + \psi_{\text{odd}}(\mathbf{r}) = \frac{\psi(\mathbf{r}) + \psi(-\mathbf{r})}{2} + \frac{\psi(\mathbf{r}) - \psi(-\mathbf{r})}{2}. \tag{8.23}$$

Задача 8.1

Покажите, что чётность волновой функции (по отношению к соответствующему аргументу) одна и та же в координатном и импульсном представлениях.

8.4 Скаляры и псевдоскаляры, векторы и псевдовекторы

Преобразование пространственной инверсии для операторов, в соответствии с общим правилом (6.101), имеет вид

$$\hat{Q}' = \hat{\mathcal{P}}\hat{Q}\hat{\mathcal{P}}^{-1}. \tag{8.24}$$

Инвариантная величина $\hat{Q}' = \hat{Q}$ коммутирует с оператором пространственной инверсии. Это даёт критерий для классификации наблюдаемых.

Полезно сочетать эту классификацию с классификацией, основанной на вращательных свойствах (позже они будут изучены гораздо более подробно). Величины, инвариантные относительно вращений, называются *скалярами*. Математическое определение скаляра $\hat{S}$ следует из интерпретации углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ как генератора вращений:

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{S}] = 0. \tag{8.25}$$

Тем не менее скаляр может некоммутировать с пространственной инверсией. Мы можем разделить скалярные наблюдаемые, удовлетворяющие уравнению (8.25), на истинные скаляры и *псевдоскаляры*, которые меняют знак при инверсии пространства. Чтобы дать физический пример, рассмотрим сначала *векторы*.

Как мы уже обсуждали, общее определение вектора $\hat{\mathbf{V}}$ может быть основано на его поведении при бесконечно малых вращениях (см. раздел 6.10). Теперь мы можем выделить два класса векторных наблюдаемых: истинные (*полярные*) векторы $\mathbf{V}$, декартовы компоненты $\hat{V}_i$ которых меняют знак при пространственной инверсии,

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{V}_i\hat{\mathcal{P}}^{-1} \equiv \hat{\mathcal{P}}\hat{V}_i\hat{\mathcal{P}} = -\hat{V}_i, \tag{8.26}$$

и *псевдовекторы*, или *аксиальные* векторы $\mathbf{A}$, компоненты которых A_i не изменяются при инверсии,

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{A}_i\hat{\mathcal{P}} = \hat{A}_i. \tag{8.27}$$

Операторы координаты, $\mathbf{r}$, и импульса, $\mathbf{p}$, являются истинными векторами. Но компоненты оператора орбитального момента, $[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$, построенного как *векторное произведение двух полярных векторов*, не меняются при пространственной инверсии, и поэтому орбитальный момент является аксиальным вектором. Формальное доказательство, например для оператора координаты, устанавливает с использованием эрмитовости оператора $\hat{\mathcal{P}}$, что произвольный матричный элемент преобразованного оператора $\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{P}}$ преобразуется как

$$\begin{aligned}\int d^3r\, \psi_1^*(\mathbf{r})\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{P}}\psi_2(\mathbf{r}) = \int d^3r\, \psi_1^*(-\mathbf{r})\hat{\mathbf{r}}\psi_2(-\mathbf{r}) = \\ = \int d^3r\, \psi_1^*(\mathbf{r})(-\hat{\mathbf{r}})\psi_2(\mathbf{r}),\end{aligned} \tag{8.28}$$

а это означает, что $\hat{\mathbf{r}}$ является истинным вектором:

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{P}} = -\hat{\mathbf{r}}. \tag{8.29}$$

Аналогично

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{P}} = -\hat{\mathbf{p}} \tag{8.30}$$

в соответствии с классическим определением $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$, которое справедливо и для квантовых уравнений движения (7.89) и (7.90). В дополнение к разнице между электрическими и магнитными полями по отношению к обращению времени они ведут себя по-разному и при пространственной инверсии: вектор электрического поля $\vec{\mathcal{E}}$ и вектор электрического тока $\mathbf{j}$ являются полярными векторами, в то время как вектор магнитного поля

$\vec{\mathcal{B}}$ аксиальный. А сила Лоренца $\sim [\mathbf{v}\times\vec{\mathcal{B}}]$, будучи векторным произведением полярного и аксиального векторов, снова является полярным (и инвариантным относительно обращения времени) вектором.

Обратите внимание, что мы используем картину *активного* преобразования, которое действует на объект, в то время как координатные орты $\mathbf{e}^{(i)}$ сохраняются неизменёнными. Полярный вектор $\mathbf{V}$ превращается в $-\mathbf{V}$; тогда его координаты V_i относительно старого набора $\mathbf{e}^{(i)}$ изменяют знак. Координаты аксиальных векторов остаются прежними вместе с самим объектом.

При *пассивной* формулировке инвертируется система координат, $\mathbf{e}^{(i)} \Rightarrow -\mathbf{e}^{(i)}$. Это преобразование превращает правую тройку координатных осей, которые определяются в соответствии с $[\mathbf{e}^{(x)}\times\mathbf{e}^{(y)}]=\mathbf{e}^{(z)}$, в левую тройку, поэтому оно меняет знак всех величин, определение которых содержит указание на ориентацию осей координат или направление вращения. Полярные векторы не затрагиваются, а их координаты V_i снова меняют знак. Аксиальные векторы, такие как орбитальный момент, меняют свое направление, в то время как их координаты опять же не меняются.

Теперь мы можем построить псевдоскаляр как скалярное произведение полярного и аксиального векторов. Но примеры из предыдущего абзаца для этой цели мы не можем использовать. В самом деле,

$$(\mathbf{r}\cdot\vec{\ell}) = (\mathbf{p}\cdot\vec{\ell}) = 0. \tag{8.31}$$

Это свойство имеет простой смысл: если $\vec{\ell}$ является генератором вращения, он перемещает частицы перпендикулярно радиус-вектору. Псевдоскаляр, называемый *спиральностью*, может быть построен с использованием другой части углового момента, а именно, спинового момента $\mathbf{s}$, который, как и любой угловой момент, также является аксиальным вектором. Спиральность h – это проекция спина на направление движения,

$$h = \mathbf{s}\cdot\frac{\mathbf{p}}{p}. \tag{8.32}$$

По отношению к вращению спиральность является скаляром, однако она меняет знак при пространственной инверсии:

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{h}\hat{\mathcal{P}} = -\hat{h}. \tag{8.33}$$

8.5 Сохранение чётности

Если потенциал в уравнении Шрёдингера инвариантен относительно пространственной инверсии,

$$U(\mathbf{r}) = U(-\mathbf{r}), \tag{8.34}$$

гамильтониан в целом, $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$, коммутирует с оператором инверсии. Поэтому мы можем приписать стационарным состояниям квантовое число чётности.

Другими словами, если волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ описывает стационарное состояние $\hat{\mathcal{P}}$-инвариантного гамильтониана с энергией E, отражённая функция $\psi(-\mathbf{r})$ также соответствует стационарному состоянию с той же энергией. Если эта энергия не вырождена, две функции могут отличаться только постоянным множителем, $\psi(-\mathbf{r}) = c\psi(\mathbf{r})$. Повторяя операцию инверсии, получим $\psi(\mathbf{r}) = c\psi(-\mathbf{r}) = c^2\psi(\mathbf{r})$, что означает $c^2 = 1$, $c = \pm 1$. Это то же самое утверждение, что и полученное ранее на операторном языке: при чётном потенциале (8.34) невырожденные стационарные решения имеют определённую чётность. Если собственное значение энергии является вырожденным, $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi(-\mathbf{r})$ могут быть линейно независимыми как, например, плоские волны с противоположными импульсами. Однако тогда любая их линейная комбинация описывает стационарное состояние с той же энергией, и всегда можно построить чётную и нечётную суперпозиции $\psi(\mathbf{r}) \pm \psi(-\mathbf{r})$.

Таким образом, если уравнение (8.34), или в более общем виде

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0, \tag{8.35}$$

выполнено, стационарные решения уравнения Шрёдингера можно классифицировать по чётности. В наших простых примерах главы 2 связанные состояния в ящике или в симметричной конечной яме (где у нас есть только одномерная инверсия) могут приобрести определённую чётность, если направить оси координат таким образом, что начало координат совпадает со средней точкой. В задачах континуума (на отражение и прохождение) симметрия была нарушена граничным условием, когда мы предположили, что источник волны расположен с одной стороны от области наблюдения. Симметрия восстанавливается из-за существования эквивалентного, зеркально отражённого решения с той же энергией, когда источник ставится на противоположной стороне.

Задача 8.2

Установить соответствие между стационарными состояниями одномерного движения в симметричном потенциале, $U_1(x) = U_1(-x)$, и в потенциале $U_2(x)$, который совпадает с $U(x)$ при $x > 0$ и отрезан от левой половины плоскости непроницаемой стенкой при $x = 0$.

Чётность составной системы является *мультипликативным* квантовым числом, будучи произведением чётностей подсистем или компонент. В применении к элементарным частицам можно говорить об их *внутренней чётности*: внутренняя волновая функция частицы также трансформируется определённым образом при пространственном отражении. Внутренняя чётность протона и нейтрона одинакова (и не имеет значения, предположим ли мы, что она чётная или нечётная, потому что во всех ядерных процессах, где чётность сохраняется, общее число *нуклонов*, нейтронов и протонов — так называемый *барионный заряд* — также сохраняется). В релятивистской теории показывается, что эта чётность противоположна чётности антинейтрона и антипротона. Внутренние чётности электрона и позитрона, кварка и антикварка тоже противоположны. В случае *мезонов*, таких как пионы или каоны, имеет смысл говорить о абсолютной внутренней чётности, так как эти частицы могут быть созданы и поглощены поодиночке, изменяя общую чётность состояния определённым образом. Волновая функция этих мезонов является скаляром при вращениях, но псевдоскаляром при пространственной инверсии, что определяется внутренней структурой мезонов, построенных из кварка и антикварка, которые имеют противоположные внутренние чётности.

Для того чтобы получить информацию о внутренней чётности частиц, нужно наблюдать процессы их образования, уничтожения и взаимной трансформации и сравнивать чётности начального и конечного состояния, учитывая внутренние волновые функции частиц, а также волновые функции их относительного движения. Эксперимент показывает, что большинство взаимодействий элементарных частиц инвариантно относительно пространственной инверсии. Насколько нам известно, только гамильтониан *слабых взаимодействий* не сохраняет чётность. Взаимодействия такого типа возникают на очень малых расстояниях между частицами, $\sim 10^{-16}$ см, они ответственны за самые медленные ядерные процессы, такие как *бета-распад* нейтрона в протон, электрон и электронное антинейтрино, или бета-распад сложных ядер. Время жизни свободного нейтрона $\sim 10^3$ с, велико по сравнению с характерным временем ядерных процессов, $10^{-(21\div 23)}$ с, которое может быть оценено по времени пролёта частицы со скоростью $\sim (0.1 \div 1)c$ через ядерный радиус $\sim 10^{-(12\div 13)}$ см.

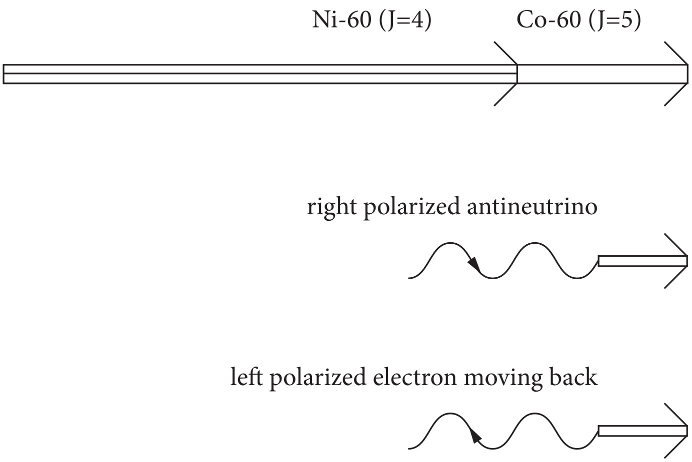

Рис. 8.2: Схема эксперимента Ц. Ву и др.

Грубо говоря, если чётность в процессе сохраняется, то в зеркально-отражённой лаборатории процесс происходит полностью аналогично и приводит к зеркально-отражённому результату. В бета-распаде это не так. В знаменитом эксперименте *Ц. Ву и др.* [39] (рис. 8.2) изучался бета-распад поляризованных (имеющих фиксированную ориентацию углового момента $\mathbf{J}$) ядер ^{60}Co. Распределение испускаемых электронов зависит от угла ϑ между импульсом электрона $\mathbf{p}$ или его скоростью $\mathbf{v}$ и направлением поляризации $\mathbf{J}$. Число электронов, испускаемых под углом ϑ, оказалось пропорционально

$$N(\vartheta) \propto 1 + \alpha \cos \vartheta \tag{8.36}$$

с коэффициентом асимметрии $\alpha \approx -v/c$ (релятивистские электроны испускаются в основном противоположно поляризации ядра).

В данном конкретном случае результат связан со свойством так называемого левого тока, ответственного за слабые взаимодействия, включая бета-распад; антинейтрино практически полностью продольно поляризовано вдоль движения (см. раздел 14.6 том III). Электрон отдачи с той же поляризацией спина (суммарный спин должен сохраняться) из-за сохранения импульса вынужден двигаться в противоположном направлении. Так как $\cos \vartheta$ определяется скалярным произведением полярного вектора $\mathbf{p}$ и аксиального вектора $\mathbf{J}$, то это псевдоскалярная величина. Поэтому в зеркальной лаборатории эта величина изменила бы знак и мы получили бы отличное угловое распределение, $\propto 1 - \alpha \cos \vartheta$. Наличие скаляра *вместе*

с псевдоскаляром в экспериментальном результате (8.36) делает результаты в двух лабораториях неэквивалентными и соответствует *несохранению чётности* в слабых взаимодействиях.

Для систем с сохранением чётности операторы с определённым поведением при пространственной инверсии выявляют специфические *правила отбора*: их матричные элементы при заданном начальном состоянии могут быть связаны только с определённым классом конечных состояний. Операторы, меняющие знак при пространственной инверсии, изменяют чётность состоянии, так что чётность конечного состояния должна быть противоположной чётности исходного. Возьмём, например, переходы, индуцированные *дипольным моментом* распределения заряда (задача 7.9). Дипольный переход, описываемый матричным элементом $\langle f|\hat{\mathbf{d}}|i\rangle$, возможен только между состояниями противоположной чётности. Если чётность сохраняется, среднее значение $\mathbf{d}$ в любом состоянии с определённой чётностью запрещено. Наличие ненулевого дипольного момента в *стационарном состоянии* указывает на несохранение чётности. Существование полярных молекул (например, воды или NH_3) показывает, что либо состояние не является стационарным, хотя, может быть, с большим временем жизни, либо ориентация молекулы фиксируется внешними полями. В свободном стационарном состоянии молекула имеет определённый угловой момент и вращение усредняет собственный дипольный момент до нуля.

Экспериментальный поиск в течение долгого времени электрического дипольного момента в элементарных частицах, атомах и ядрах до сих пор не представил определённых результатов, лишь понижая всё дальше и дальше верхнюю границу его значения. Между тем несохранение чётности в слабых взаимодействиях является хорошо установленным фактом. Проблема с дипольным моментом усугубляется векторным характером этого оператора. Его среднее значение в стационарном состоянии должно быть направлено по единственному сохраняющемуся вектору, характеризующему систему, а именно — по его полному угловому моменту. Однако угловой момент меняет знак при обращении времени, в то время как дипольный момент не меняет. Таким образом, обнаружение дипольного момента противоречило бы также $\mathcal{T}$-инвариантности. Силы, которые *одновременно* являются $\mathcal{P}$- и $\mathcal{T}$-нарушающими гораздо слабее, чем силы «нормальных» слабых взаимодействий.

Другой полярный вектор, так называемый *анапольный момент*, пропорционален векторному произведению $[\mathbf{r}\times\mathbf{s}]$, где $\mathbf{s}$ является оператором спина. Он изменяет чётность состояния, хотя его существование не противоречит $\mathcal{T}$-инвариантности. Нарушающий чётность анапольный момент был изме-

рен в атомах цезия [40]. С другой стороны, магнитный дипольный момент $\vec{\mu}$ является аксиальным вектором пропорциональным орбитальному или спиновому моменту частицы (см. (1.74)). Существование ненулевого среднего магнитного момента согласуется как с $\mathcal{P}$-, так и с $\mathcal{T}$-инвариантностью.

8.6 Симметрия кристаллической решётки

Мы знаем, что оператор импульса генерирует перемещения в пространстве. Плоская волна является собственной функцией оператора импульса и, следовательно, оператора конечного сдвига $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{a})$: при этом преобразовании плоская волна просто получает дополнительную фазу (см. уравнение (4.61)). Смещение $\mathbf{a}$ может быть любым вещественным вектором. Кроме того, различные операторы сдвига коммутируют, образуя абелеву группу.

Картина становится более сложной, когда вместо свободного движения мы переходим к движению в поле *идеальной кристаллической решётки*. Сходство со случаем свободного движения остаётся в том, что можно назвать группой *смещений решётки*. Бесконечная решётка не меняется при сдвиге на *целое* число периодов, тогда как свободное пространство инвариантно при любом сдвиге. Здесь мы сохраняем только дискретную *подгруппу* полной предыдущей группы. Это вход в область физики твёрдого тела. Сформулируем ситуацию более точно (но не вдаваясь в подробности кристаллографии).

Мы называем *идеальным кристаллом* систему, гамильтониан которой не меняется при смещении $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{R}_i)$ на любой вектор решётки $\mathbf{R}_i$. Эти векторы маркируют узлы решётки и могут быть представлены в виде комбинаций трех базисных векторов $\mathbf{a}_j$, $j = 1, 2, 3$, с целыми коэффициентами $n_i^{(j)} = 0, \pm 1, ...$:

$$\mathbf{R}_i = n_i^{(1)}\mathbf{a}_1 + n_i^{(2)}\mathbf{a}_2 + n_i^{(3)}\mathbf{a}_3. \tag{8.37}$$

Векторы $\mathbf{a}_j$ линейно независимы, хотя и не обязательно ортогональны. Минимальный объём, который может быть повторён при построении всего кристалла, — это объём *элементарной ячейки*

$$V^\circ = \Big|[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2] \cdot \mathbf{a}_3\Big|. \tag{8.38}$$

Для дальнейшего рассмотрения мы также нуждаемся в *обратной решётке* с базисом, образованным тремя векторами $\mathbf{b}_j$, $j = 1, 2, 3$, которые определяются через их скалярные произведения с векторами $\mathbf{a}_j$ прямой

решётки,

$$(\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_{j'}) = \delta_{jj'}. \tag{8.39}$$

В простейшем случае кубической решётки, когда векторы $\mathbf{a}_j$ взаимно ортогональны и равны по длине, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| = a$, векторы $\mathbf{b}_j$ также образуют кубическую решётку с периодом $b = 1/a$. Удобно построить обратную решётку аналогично (8.37), но с дополнительным фактором 2π, используя семейство векторов

$$\mathbf{K}_i = 2\pi\Big(n_i^{(1)}\mathbf{b}_1 + n_i^{(2)}\mathbf{b}_2 + n_i^{(3)}\mathbf{b}_3\Big). \tag{8.40}$$

Тогда для любой пары векторов $\mathbf{R}_i$ и $\mathbf{K}_j$ имеет место простое тождество

$$e^{i(\mathbf{K}_j \cdot \mathbf{R}_i)} = 1. \tag{8.41}$$

Инвариантность кристалла относительно сдвигов $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{R}_i)$ выполняется, строго говоря, только для бесконечной решётки. На самом деле кристалл имеет конечные размеры L_x, L_y, L_z. Для макроскопического кристалла, $L \gg a$, детали граничных условий несущественны (хотя они могут играть важную роль для нанокристаллов). Поэтому мы можем представить, что кристалл периодически продолжается во всех направлениях и пространство равномерно заполнено бесконечным количеством идентичных копий реального образца. В этом предположении волновая функция объекта, движущегося внутри кристалла, удовлетворяет тем же периодическим условиям, которые применялись в разделе 3.8.

8.7 Квазиимпульс и функции Блоха

Инвариантность относительно произвольных трансляций приводит к сохранению импульса при свободном движении. Хотя решётка инвариантна только по отношению к трансляциям $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{R}_i) \equiv \hat{\mathcal{D}}_i$, отображающим решётку саму в себя, мы всё же можем найти аналог импульса, который сохраняется в этой ситуации.

Гамильтониан идеальной решётки коммутирует со всеми трансляциями решётки (периодические граничные условия передают эту инвариантность кристаллу конечных размеров),

$$[\hat{\mathcal{D}}_i, \hat{H}] = 0. \tag{8.42}$$

Как операторы, принадлежащие к подгруппе полной группы трансляций, эти трансляции также коммутируют между собой. Таким образом, энергия E и все *сдвиги* $\mathcal{D}_i$ могут иметь одновременно определённые значения в стационарном состоянии. Однако волновые функции в периодическом потенциале в общем случае не являются плоскими волнами.

Рассмотрим задачу на собственные значения для объекта (назовём его *квазичастицей*), который движется в идеальном кристалле. Стационарные собственные функции $\psi(\mathbf{r})$ всех операторов $\hat{\mathcal{D}}_i$ подчиняются уравнению

$$\hat{\mathcal{D}}_i\psi(\mathbf{r}) = c_i\psi(\mathbf{r}). \tag{8.43}$$

Как и для любого унитарного оператора, собственные значения — это комплексные числа на единичной окружности, $|c_i|^2 = 1$. С другой стороны, результат должен быть просто сдвинутой функцией:

$$\hat{\mathcal{D}}_i\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \tag{8.44}$$

Чтобы найти числа $c_i \equiv c(\mathbf{R}_i)$, мы можем использовать групповое свойство сдвигов на решётке: произведение сдвигов $\hat{\mathcal{D}}_i\hat{\mathcal{D}}_j$ эквивалентно сдвигу $\hat{\mathcal{D}}_{(ji)} = \hat{\mathcal{D}}_{(ij)}$ на вектор $\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j$, т. е.

$$\hat{\mathcal{D}}_{(ji)}\psi(\mathbf{r}) = c(\mathbf{R}_j + \mathbf{R}_i)\psi(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{D}}_j\hat{\mathcal{D}}_i\psi(\mathbf{r}) = c(\mathbf{R}_j)c(\mathbf{R}_i)\psi(\mathbf{r}) \tag{8.45}$$

или

$$c(\mathbf{R}_j + \mathbf{R}_i) = c(\mathbf{R}_j)c(\mathbf{R}_i). \tag{8.46}$$

Решение, удовлетворяющее требованию унитарности, имеет вид

$$c(\mathbf{R}_j) = e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j)}, \tag{8.47}$$

где $\mathbf{k}$ представляет собой произвольный вещественный вектор, характеризующий изменение фазы собственной функции при смещении на вектор решётки,

$$\hat{\mathcal{D}}_i\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i)}\psi(\mathbf{r}). \tag{8.48}$$

Сравнение (8.48) с аналогичным результатом (4.61) для пространственно однородной системы показывает, что вектор $\mathbf{k}$ на решётке играет ту же роль, что и волновой вектор $\mathbf{p}/\hbar$ в однородном случае, оба определяются через сдвиг фазы собственной функции при пространственном сдвиге. Таким об-

разом, естественно использовать слово *квазиимпульс* или *кристаллический импульс* для вектора $\hbar\mathbf{k}$, характеризующего волновую функцию квазичастицы в кристалле (мы будем часто также называть волновой вектор $\mathbf{k}$ квазиимпульсом). Так как плоская волна, в сущности, определяется её трансформацией при смещениях, волновая функция квазичастицы также определяется вектором $\mathbf{k}$, поэтому мы будем использовать обозначение $\psi_{\mathbf{k}}$.

Будем искать собственную функцию всех операторов трансляций как произведение плоской волны и некоторой другой функции,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{8.49}$$

Тогда из уравнения (8.48) следует, что для любого сдвига $\mathbf{R}_i$

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}). \tag{8.50}$$

Это означает, что амплитудная функция $u(\mathbf{r})$ не меняется при сдвигах решётки. Мы пришли к *теореме Блоха*: волновая функция стационарного состояния квазичастицы на решётке характеризуется квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и может быть представлена в виде (8.49), где функция $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ является *периодической* с периодом, равным периоду решётки. От плоской волны в однородной среде мы пришли к плоской волне, *модулированной с периодом решётки*. Явный вид модулирующей функции $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ не может быть найден в общем случае; эта функция, например, может иметь максимумы или минимумы в узлах решётки.

Мы не удовлетворили периодическим граничным условиям (3.93). Поскольку модулирующая функция является периодической на решётке, она не меняется при сдвиге на размер L всего кристалла. Поэтому циклические условия, которые применяются к фактору плоской волны в функции (8.49), являются идентичными однородному случаю (3.93). Таким образом, компоненты квазиимпульса равны

$$k_i = \frac{2\pi}{L_i}\,n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \ldots . \tag{8.51}$$

Это означает, что квазиимпульс квантуется как обычный импульс в ящике с циклическими граничными условиями.

Теперь обратимся к *разнице* между импульсом и квазиимпульсом. Последний не является однозначным. Он определяется через изменение фазы (8.48) волновой функции при сдвиге решётки. Однако та же цель может быть достигнута с любым вектором $\mathbf{k}'$, который отличается от $\mathbf{k}$ на про-

извольный вектор $\mathbf{K}$ (уравнение (8.40)) обратной решётки. В силу (8.41) векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}$ определяют одну и ту же фазу (8.47). Когда вектор $\mathbf{k}$ пробегает по всему $\mathbf{k}$-пространству, волновая функция $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ периодически возвращается к своему значению с периодом обратной решётки. Мы заключаем, что волновая функция $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и её энергия $E_{\mathbf{k}}$ — *периодические функции* на обратной решётке.

Имеет смысл ограничить $\mathbf{k}$-пространство минимальным набором векторов $\mathbf{k}$, который определит все различные функции $\psi_{\mathbf{k}}$. Очевидно, что этот набор заполняет элементарную ячейку обратной решётки. Хотя выбор такой ячейки не является однозначным, её объём $V^{\circ}_{\text{recipr}}$ фиксирован. Величина этого объёма равна обратному объёму (8.38) элементарной ячейки прямой решётки. Подсчёт квантованных, согласно (8.51), компонент k_i приводит, как и в (3.94), к интегралу по элементарной ячейке обратной решётки

$$\sum_{n_x n_y n_z} \Rightarrow \int \frac{dk_x}{2\pi/L_x} \frac{dk_y}{2\pi/L_y} \frac{dk_z}{2\pi/L_z} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k. \tag{8.52}$$

С учётом фактора 2π в определении (8.40) эта величина равна

$$V \cdot V^{\circ}_{\text{recipr}} = N V^{\circ} V^{\circ}_{\text{recipr}} = N, \tag{8.53}$$

где N есть число элементарных ячеек в фактическом образце. В результате имеется N нетривиальных различных значений квазиимпульса $\mathbf{k}$.

Конечно, так и должно быть. Мы можем построить кристалл, добавляя ячейку к ячейке, чтобы обеспечить возможность квазичастице быть локализованной на каждом узле (атомы, образующие решётку). Все места одинаковы и все локализованные состояния также идентичны, что приводит к одной той же волновой функции с центром в разных точках. Поэтому любой атомный уровень, повторенный в каждом ячейке, приводит к N состояниям всего кристалла. Теперь позволим квазичастицам распространяться по кристаллу, изменяя своё местоположение; вместо локализованных состояний мы приходим к волнам Блоха в качестве стационарных состояний в кристалле. Тем не менее число независимых состояний не может измениться при преобразовании в другой базис — оно по-прежнему должно быть равно N.

Задача 8.3

В блоховском состоянии, которое характеризуется квазиимпульсом $\mathbf{p}$, истинный импульс, как правило, не имеет определённого значения. Пока-

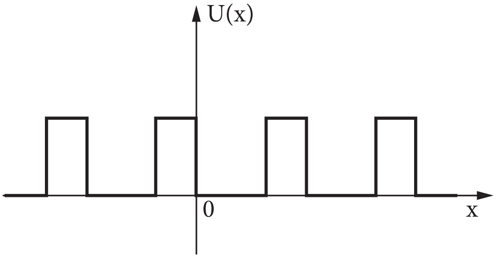

Рис. 8.3: Одномерный кристалл

зать, что только те значения $\mathbf{p}$ имеют ненулевую вероятность, для которых выполняется условие $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{K}$, где $\mathbf{K}$ является одним из векторов обратной решётки.

Решение.

Прежде всего нужно показать, что любая функция $f(\mathbf{r})$, которая является периодической с периодом решётки, может иметь ненулевые Фурье-компоненты $f_{\mathbf{q}}$ только при $\mathbf{q} = \mathbf{K}$.

Задача 8.4

Рассмотрим стационарное состояние *рассеяния* двух квазичастиц в кристалле. Вначале они находятся на большом расстоянии как независимые объекты с квазиимпульсами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, подходят друг к другу, взаимодействуют и уходят с асимптотическими значениями квазиимпульсов $\mathbf{k}_3$ и $\mathbf{k}_4$. Показать, что существует закон сохранения в виде

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{K}, \qquad (8.54)$$

где $\mathbf{K}$ является одним из векторов обратной решётки. Случаи с $\mathbf{K} \neq 0$ называются *процессами переброса*.

8.8 Энергетические зоны

Энергетический спектр квазичастицы в кристалле состоит из энергетических зон. Идентичные уровни энергии отдельных атомов вырождены. В результате *связи* между ячейками в кристалле образуются зоны. Каждая зона по-прежнему содержит N уровней, которые характеризуются теперь N значениями квазиимпульсов.

Задача 8.5

Рассмотрим одномерную цепочку из N идентичных притягивающих потенциальных ям с периодом a (см. рис. 8.3). Каждая яма имеет связанное состояние с энергией ε. Частицы могут туннелировать между соседними ямами с амплитудой туннелирования v; туннельные (*прыжковые*) амплитуды должны рассматриваться как матричные элементы гамильтониана, ответственные за переходы между соседними ячейками. Найти стационарные состояния и энергетический спектр системы.

Решение.

Гамильтониан (в базисе локализованных состояний $|j\rangle$, помеченных по их местоположению, $j = 1, ..., N$) может быть записан в терминах его матричных элементов

$$H_{jj'} = \varepsilon\delta_{jj'} + v(\delta_{j,j'+1} + \delta_{j,j'-1}). \tag{8.55}$$

Нам нужно диагонализовать эту матрицу $N \times N$. Стационарные бегущие волны — это суперпозиции локализованных состояний,

$$|\psi\rangle = \sum_j x_j|j\rangle. \tag{8.56}$$

Уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{8.57}$$

приводит к рекуррентным соотношениям для амплитуд x_j,

$$(\varepsilon - E)x_j + v(x_{j+1} + x_{j-1}) = 0. \tag{8.58}$$

Решением является экспонента, $x_j \propto \exp(j\xi)$, но условие унитарности выбирает чисто мнимые экспоненты $\xi = ika$, где k — квазиимпульс и aj — координата ячейки j,

$$x_j = Xe^{ikaj}, \tag{8.59}$$

так что в каждой следующей ячейке волна Блоха получает необходимую фазу ka, в то время как квазиимпульс k различает возможные решения. Величина (8.59) играет роль координатной волновой функции в нашем дискретном пространстве; модулирующей функцией u_k здесь является константа. При подстановке (8.59) секулярное уравнение (8.58) определяет

энергетический спектр

$$E(k) = \varepsilon + 2v\cos(ka). \tag{8.60}$$

N-кратно вырожденный уровень ε расширяется до *энергетической полосы* от $\varepsilon - 2v$ до $\varepsilon + 2v$. Квантование (8.51) квазиимпульса, $k = (2\pi/Na)n$, даёт N уровней с n изменяющимся от $n = -N/2$, $k = -\pi/a$ до $n = N/2$, $k = \pi/a$ и

$$|\psi_n\rangle = X\sum_j e^{i(2\pi n/N)j}|j\rangle \tag{8.61}$$

играет роль импульсной волновой функции в дискретном случае. Нормировка функции (8.61) определяет $X = 1/\sqrt{N}$.

Как правило, квазиимпульс $\mathbf{k}$ не определяет однозначно состояние квазичастицы, как в задаче 8.5. Волновые функции с различной модуляцией $u_{\mathbf{k}}$ могут иметь одинаковые фазовые сдвиги при смещениях. Если вместо одного уровня в каждой яме было бы два уровня, то мы получили бы *две энергетических зоны* с N уровнями в каждой. Уровни с одинаковыми $\mathbf{k}$ следует отличать по дополнительным квантовым числам, например, по их происхождению от определённого состояния отдельного атома или просто по порядковому номеру, соответствующему возрастанию энергии. Даже без всякого периодического потенциала состояния свободного движения могут искусственно описываться с помощью квазиимпульса $|k| < \pi/a$ для произвольного значения периода a и номера зоны (см. рис. 8.4a). Наличие потенциала с реальным периодом a приводит к новому спектру (8.60) в зоне (рис. 8.4b).

Сложность энергетического спектра, как правило, связана с тем, что зоны могут *перекрываться* по энергии. С другой стороны, могут быть запрещённые интервалы между зонами, где нет никаких уровней ($\Delta\varepsilon$ на рис. 8.4b). В твёрдых телах эта структура энергетических зон определяет свойства проводимости (металлы, полупроводники и диэлектрики).

8.9 Симметрия молекул

В разделе 5.7 мы кратко упомянули классификацию молекулярных возбуждений. Ядра в молекуле образуют скелет, который имеет определённую пространственную структуру. Так как амплитуды нулевых колебаний ядер значительно меньше среднего расстояния между ними, эта пространственная симметрия является характерным свойством молекулы, которое позво-

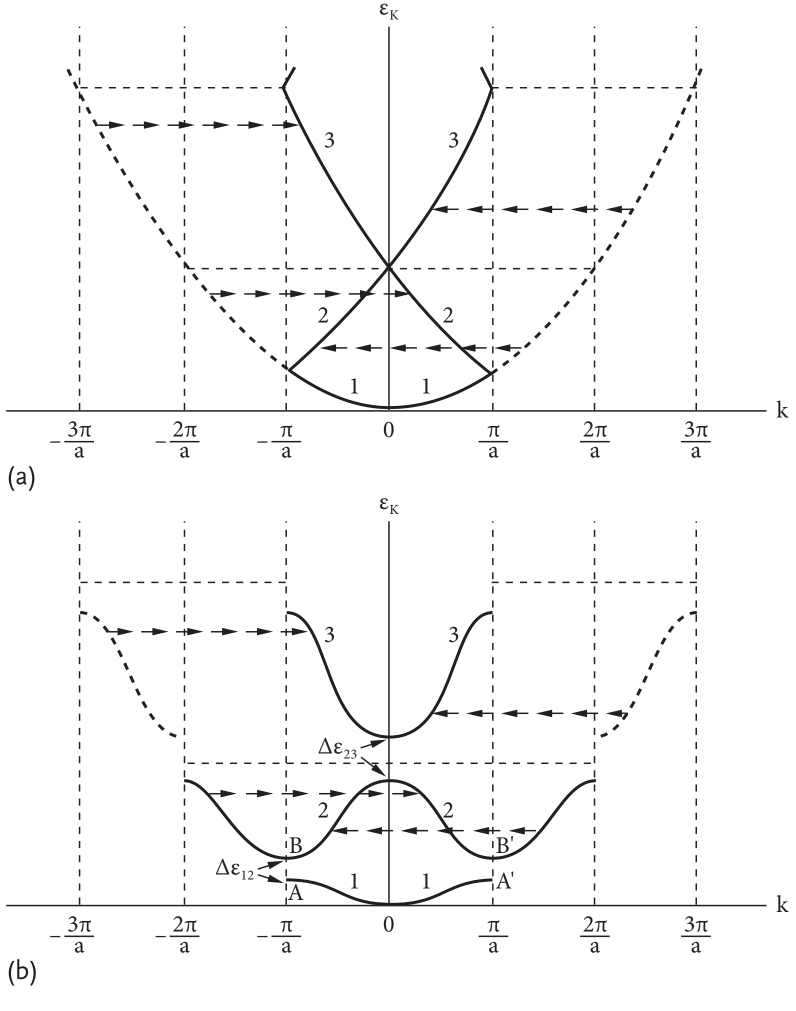

Рис. 8.4: Спектр свободного движения в зонной картине (a); спектр (8.60), искажённый периодическим потенциалом (b)

ляет предсказать нормальные колебательные моды и степень вырождения частот.

Мы знаем, что среди $3N$ пространственных степеней свободы молекулы с N атомами три из них соответствуют смещениям, а ещё три — вращениям как целого. Остальные $3N - 6$ степеней свободы отвечают модам нормальных колебаний. Исключением являются *линейные* молекулы, которые имеют только $3N - 5$ глобальных степеней свободы, и мы можем их клас-

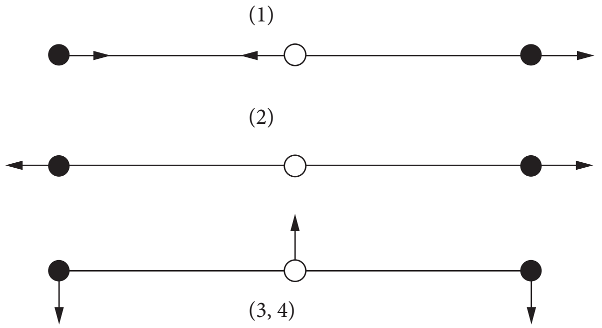

Рис. 8.5: Нормальные моды CO_2 молекулы

сифицировать рассматривая движения вдоль оси и в перпендикулярных направлениях. Продольное движение N атомов даёт $N-1$ нормальных мод (перемещение как целого вдоль оси должно быть исключено).

Остальные $(3N-5)-(N-1)=2(N-2)$ степеней свободы соответствуют поперечным колебаниям. Вследствие симметрии между двумя перпендикулярными осями у нас есть $(N-2)$ мод с двойным вырождением. Таким образом, для линейной молекулы CO_2 с $N=3$, как показано на рис. 8.5, у нас есть две продольных моды (*1*, *2*) и одна дважды вырожденная (*3*, *4*) поперечная мода. Из-за идентичности атомов кислорода можно далее утверждать, что из двух продольных мод одна симметрична, а другая антисимметрична по отношению к смещениям атомов кислорода.

Задача 8.6

Выполнить классификацию нормальных колебательных мод для молекулы, у которой имеется N атомов в плоскости. В качестве примеров рассмотреть плоские молекулы H_2O и BF_3.

Решение.

N атомов в плоскости имеют $2N$ плоских степеней свободы, из них две поступательных и одна вращательная (вокруг вертикальной оси), следовательно $2N-3$ плоских колебаний. Число нормальных колебаний, выводящих из плоскости, равно $(3N-6)-(2N-3)=N-3$. Молекула воды $(N=3)$ имеет только три плоских колебания. Для молекулы BF_3 $(N=4)$ мы находим пять колебательных мод в плоскости и только одну вне плоскости (атомы фтора и бора смещаются в противоположные стороны от плоскости).

Как и в примере с молекулой CO_2, наличие *одинаковых* атомов даёт дополнительные свойства симметрии. В этом случае для любой оси, перпен-

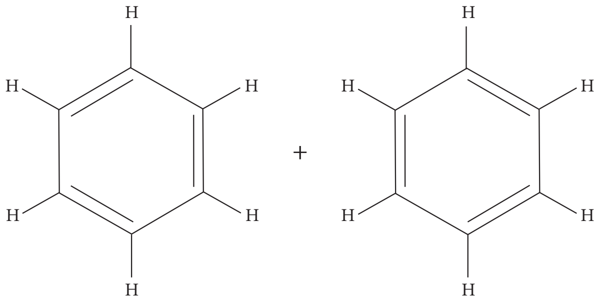

Рис. 8.6: Ось шестого порядка в молекуле бензола. Горизонтальная плоскость также является элементом симметрии

дикулярной к оси молекулы, возможен поворот на 180°, который переводит молекулу в идентичную конфигурацию. Таким образом, это вращение $\hat{\mathcal{R}}(\pi)$ принадлежит *группе симметрии* преобразований, при которых молекула преобразуется сама в себя. Наличие подходящей оси является *элементом симметрии*. Если n эквивалентных дискретных конфигураций могут быть получены вращением вокруг некоторой оси на углы

$$\alpha_k = \frac{2\pi}{n}k, \quad k = 1, ..., n, \tag{8.62}$$

это *ось симметрии* C_n n-го порядка. Вращения $\hat{\mathcal{R}}_n^k$ на углы (8.62) образуют *циклическую группу* с единичным элементом $\hat{\mathcal{R}}_n^n = \hat{1}$ (вспомним решение задачи 4.6). В молекуле бензола (рис. 8.5) мы имеем ось C_6. Химический образ представляет суперпозицию двух конфигураций с чередующимися обычными и двойными связями атомов углерода (находящихся в шести углах), которые смещены относительно друг друга таким образом, что вся суперпозиция восстанавливается после поворота на $2\pi/6$ вокруг оси C_6; эта ситуация иногда называется резонансом химических структур.

Группы симметрии, встречающиеся в молекулах, называют *точечными группами*; в кристаллах мы имеем дело с *пространственными группами*, включающими трансляции. Другими элементами симметрии могут быть: *плоскость симметрии*, вертикальная (σ_v) или горизонтальная (σ_h) по отношению к оси симметрии (отражение в плоскости приводит к эквивалентной конфигурации); *центр симметрии*, соответствующая операция — это *инверсия* $\hat{\mathcal{P}}$, обсуждавшаяся ранее (обозначается как i в молекулярной физике); *ось зеркального отражения* n-го порядка, которую обычно называют S_n. В последнем случае групповые операции S_n^k представляют

собой последовательности из k комбинаций вращения на $2\pi/n$ вокруг оси S_n с последующим отражением в плоскости, перпендикулярной к этой оси. Это новый элемент только для *чётных* значений n; при нечётном n наличие S_n означает, что одновременно существуют ось симметрии C_n и горизонтальная плоскость σ_h.

В *линейных* молекулах молекулярная ось ζ обеспечивает симметрию при любых вращениях вокруг этой оси, которая называется C_∞. Кроме того, любая вертикальная плоскость является плоскостью симметрии C_v. Вся группа симметрии называется $\mathcal{C}_{\infty v}$. В присутствии центра симметрии, как в случае CO_2 с идентичными атомами, добавляется отражение σ_h и группа называется $\mathcal{D}_{\infty h}$. Вращения электронов вокруг оси симметрии оставляют гамильтониан инвариантным. Генератор таких вращений – это проекция электронного углового момента $\hat{J}_\zeta \equiv (\hat{\mathbf{J}}\cdot\mathbf{n})$, где $\mathbf{n}$ — единичный вектор вдоль оси симметрии. В общем случае мы должны вращать как орбитальные, так и спиновые переменные, так что нам нужно два генератора,

$$\hat{J}_\zeta = \hat{L}_\zeta + \hat{S}_\zeta \quad \Rightarrow \quad \Omega = \Lambda + \Sigma, \tag{8.63}$$

где мы ввели традиционные обозначения для собственных значений проекций углового момента на ось симметрии. Заметьте, что это проекции на ось, которая *скреплена с телом* и перемещается вместе с самой молекулой. Их не следует путать с проекциями на «пространственно-неподвижные» оси, которые выбраны произвольно в лаборатории.

Проекция Λ принимает целые значения. Её абсолютное значение $|\Lambda|$, как правило, помечается большими греческими буквами, соответствующими стандартным спектроскопическим обозначениям для значений ℓ: Σ, Π, Δ, Φ,... для $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$ соответственно. Для группы симметрии $C_{\infty v}$ отражение относительно вертикальной оси симметрии оставляет гамильтониан инвариантным, меняя знак Λ, если $\Lambda \neq 0$, поэтому состояния с $L_\zeta = \pm\Lambda$ вырождены. В соответствии со значением орбитального момента как генератора вращений, волновые функции приобретают множитель $e^{\pm i\Lambda\varphi}$ при повороте на угол φ, знак определяется по направлению вращения. Поскольку отражение σ_v меняет этот знак, волновые функции с $\Lambda \neq 0$ приобретают комплексное сопряжение. Σ-уровни ($\Lambda = 0$) могут иметь вместо этого вырождения знак ± 1 при отражении σ_v; соответствующие обозначения имеют вид $\Sigma^\pm$.

Добавляя центр симметрии (переходя к группе $\mathcal{D}_{\infty h}$), мы приобретаем пространственную инверсию, отражение σ_h и вращение на 180° вокруг любой горизонтальной оси, проходящей через центр (симметрия C_2). Со-

стояния разделяются по их *чётности* при пространственной инверсии; в молекулярной физике приняты обозначения g (от немецкого *gerade* — чётный), $\mathcal{P} = +1$ и u (от немецкого *ungerade* — нечётный), $\mathcal{P} = -1$. Похожие элементы симметрии могут быть определены для деформированных аксиально-симметричных ядер.

8.10 Ещё теория групп: сопряжённые классы*

Здесь мы бегло рассмотрим проблему симметрии с более абстрактной точки зрения — с точки зрения теории групп.

Группа может быть разбита на *классы* (не подгруппы) следующим образом. Класс полностью определяется единственным элементом g. Пусть x пробегает по группе. Отнесём все элементы xgx^{-1} к одному и тому же классу и назовём их *сопряжёнными* к g (тот же результат может быть получен для нескольких различных x). Если $f = xgx^{-1}$ и $h = ygy^{-1}$ принадлежат к этому классу, они сопряжены друг с другом, потому что

$$h = ygy^{-1} = yx^{-1}fxy^{-1} = (yx^{-1})f(yx^{-1})^{-1}. \tag{8.64}$$

Таким образом, не имеет значения, какой элемент класса изначально рассматривать в качестве исходного. Взяв элемент, который не принадлежит к этому классу, и повторяя процедуру, мы сформируем второй сопряжённый класс. Продолжим идти по этому пути до тех пор, пока не исчерпаем всю группу. Единичный элемент *1* образует класс сам по себе, $x1x^{-1} = 1$ при любом x. Этот класс является тривиальной подгруппой. Другие классы не содержат единичного элемента и, следовательно, не являются подгруппами. В абелевой группе каждый элемент образует отдельный класс $xgx^{-1} = g$.

В качестве примера сопряжённого класса можно взять все вращения $R_{\mathbf{n}}(\alpha)$ в трёхмерном пространстве вокруг различных осей $\mathbf{n}$, но на один и тот же угол α. В самом деле, фиксируя первоначальное направление $\mathbf{n}_0$, мы можем найти вращение R^{-1}, которое совмещает любое направление $\mathbf{n}$ с $\mathbf{n}_0$. После этого мы делаем поворот на требуемый угол α и затем возвращаем ось вращения в исходное положение с помощью преобразования R.

8.11 Представления групп*

Представления групп позволяют связать понятие симметрии с гильбертовым пространством квантовых состояний. Назовём *представлением* отображение группы $\mathcal{G}$ элементов $\{g\}$ на группу линейных операторов $\hat{g}$,

действующих в n-мерном линейном пространстве $\mathcal{L}$; в данном случае, n — это размерность представления. Пусть $|k\rangle$ — ортонормированный базис в линейном векторном пространстве, $k = 1, \dots, n$. Оператор $\hat{g}$ определяется его действием на векторы базиса и может быть охарактеризован его матрицей $D(g)$ с матричными элементами $D_{jk}(g)$ в заданном базисе,

$$\hat{g}|k\rangle = \sum_j |j\rangle D_{jk}(g), \quad D_{jk}(g) \equiv \langle j|\hat{g}|k\rangle, \tag{8.65}$$

где эквивалентное обозначение Дирака введено для матричных элементов. Отображение

$$g \to \hat{g} \to D(g) \tag{8.66}$$

должно быть *гомоморфным*, т. е. произведение элементов группы $g_1 g_2$ должно соответствовать произведению $D(g_1)D(g_2)$ матриц, отображающих эти элементы,

$$D(g_1 g_2) = D(g_1)D(g_2), \quad D(g^{-1}) = D^{-1}(g), \quad D(e) = \mathit{1}, \tag{8.67}$$

где $\mathit{1}$ — единичная матрица $n \times n$ и e — единичный элемент из $\mathcal{G}$.

Рассмотрим стационарное уравнение Шрёдингера для частицы в потенциале $U(\mathbf{r})$. Пусть поле $U(\mathbf{r})$ обладает пространственной симметрией, т. е. инвариантно относительно преобразований координат g, $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = g\mathbf{r}$, так что $U(g\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$. Эти преобразования могут быть дискретными, как в случае кристаллической решётки, или непрерывными, как, например, вращение. Определим представление как соответствие между элементами группы g и операторами $\hat{g}$, действующими на волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ согласно

$$\hat{g}\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r}). \tag{8.68}$$

Новая функция ψ' имеет в точке $\mathbf{r}$ то же значение, которое было в точке $g^{-1}\mathbf{r}$ до преобразования.

Если $\psi(\mathbf{r})$ удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера для энергии E, то рассматривая уравнение в точке $g^{-1}\mathbf{r}$ и воспользовавшись инвариантностью потенциала, мы видим, что $\psi'(\mathbf{r})$ является решением с той же энергией (в общем случае линейно независимым от исходного решения). Это означает, что оператор $\hat{g}$, или матрица $D(g)$, действует в подпространстве решений $\mathcal{L}_E$ уравнения Шрёдингера при заданной энер-

гии E. Размерность этого векторного пространства является кратностью вырождения этого собственного значения. Другими словами, пространство $\mathcal{L}_E$ отображается само в себя согласно представлению D группы $\mathcal{G}$. Легко проверить гомоморфизм этого соответствия: если $g = g_1 g_2$,

$$\begin{aligned}\hat{g}_1\hat{g}_2\psi(\mathbf{r}) = \hat{g}_1\psi(g_2^{-1}\mathbf{r}) = \psi(g_2^{-1}(g_1^{-1}\mathbf{r})) = \psi((g_1g_2)^{-1}\mathbf{r}) = \\ = \psi(g^{-1}\mathbf{r}) = \hat{g}\psi(\mathbf{r}).\end{aligned} \tag{8.69}$$

Далее будет более удобно говорить о матрицах $D(g)$, предполагая некоторый выбор базиса в $\mathcal{L}_E$.

Если $g \to D(g)$ является представлением группы $\mathcal{G}$, мы можем построить *эквивалентное* представление $g \to D_A(g) = AD(g)A^{-1}$ с помощью любого несингулярного оператора A. Справедливо следующее соответствие:

$$\begin{aligned} D_A(g_1g_2) &= AD(g_1g_2)A^{-1} = AD(g_1)D(g_2)A^{-1} \\ &= AD(g_1)A^{-1}AD(g_2)A^{-1} = D_A(g_1)D_A(g_2). \end{aligned} \tag{8.70}$$

Все представления, эквивалентные данному представлению, эквивалентны друг другу и образуют класс эквивалентных представлений. Обычно мы заинтересованы в поиске возможных неэквивалентных представлений.

Удобно выбрать из каждого класса в качестве его основного представителя *унитарное* представление, которое сохраняет скалярное произведение векторов,

$$\Big(D(g)\psi_1, D(g)\psi_2\Big) = (\psi_1, \psi_2). \tag{8.71}$$

В конечных группах каждый класс эквивалентных представлений содержит унитарные представления. Это имеет смысл и для бесконечных групп, которые обладают свойствами *компактности*, как, например, группа вращений, которая характеризуется угловыми параметрами, изменяющимися в конечных интервалах. Группа Лоренца некомпактна (здесь мы не будем вдаваться в подробности).

Представление $D(g)$, действующее в линейном пространстве $\mathcal{L}$, *приводимо*, если $\mathcal{L}$ содержит нетривиальное (не пустое и не совпадающие с самим $\mathcal{L}$) *инвариантное подпространство* $\mathcal{L}_1$. Инвариантность означает, что для любого вектора ψ из $\mathcal{L}_1$ и для любого элемента группы g преобразованный вектор $D(g)\psi$ принадлежит также к $\mathcal{L}_1$. Если $\mathcal{L}$ не содержит нетривиальных подпространств, инвариантных относительно всех $D(g)$, представление *неприводимо*. Легко найти неприводимые представления

циклических групп $\mathcal{C}_N$. Как и для любой абелевой группы, они являются одномерными, и каждое неприводимое представление даётся собственной функцией всех элементов, $g, g^2, ..., g^N = e$ (единичный элемент). Собственные значения g равны $\varepsilon_n = \exp(i2\pi n/N)$, где $n = 1, 2, ..., N$ и собственные функции удовлетворяют уравнению $g^n \psi_n = \varepsilon_n \psi_n$. Для точечной группы $\mathcal{C}_N$ вращений вокруг некоторой оси собственные функции, как функции азимутального угла φ, можно записать в виде $\psi_n(\varphi) = \exp(in\varphi)$. Уместно вспомнить из раздела 4.7, что они являются собственными функциями оператора проекции углового момента на ось симметрии. В этом случае нетривиальные значения этой проекции равны $0, 1, ..., N-1$.

Возьмём в качестве примера $\mathcal{D}_n$ — группу симметрии системы, которая имеет ось симметрии z n-го порядка (циклическая подгруппа $\mathcal{C}_n$ вращений на углы $2\pi k/n$) *и* ось симметрии второго порядка, перпендикулярную к z. Рассмотрим так называемое *векторное* представление: группу преобразований, определённую в (трёхмерном в данном случае) векторном пространстве, которая представлена теми же элементами, рассматриваемыми как операторы (матрицы) в этом векторном пространстве. Очевидно, что существуют два инвариантных подпространства: одномерное (все векторы вдоль оси z) и двумерное (все векторы в плоскости xy).

Пусть $\mathcal{L}_1$ является нетривиальным инвариантным подпространством по отношению к $D(g)$. Рассмотрим действие $D(g)$ на векторы $\mathcal{L}_1$ и назовём эту часть первоначального оператора $D_1(g)$. Соответствие $g \to D_1(g)$ является снова представлением, но теперь в меньшем пространстве $\mathcal{L}_1$. Оно также является унитарным, если было унитарным $D(g)$. Говорят, что приводимое представление $D(g)$ *индуцирует* представление $D_1(g)$ в инвариантном подпространстве $\mathcal{L}_1$. Если $D(g)$ является унитарным, оно сохраняет ортогональность между векторами в $\mathcal{L}_1$ и в остальном внутреннем пространстве $\mathcal{L}$ (ортогональном дополнении $\mathcal{L}_2 \equiv \bar{\mathcal{L}}_1$). Таким образом, дополнение $\mathcal{L}_2$ также инвариантно относительно $D(g)$. Это означает, что $\mathcal{L}$ разделено на два взаимно ортогональных инвариантных подпространства и приводимое представление $D(g)$ распадается фактически на сумму представлений D_1 и D_2, действующих в этих подпространствах. Это приведение может быть продолжено до тех пор, пока исходное приводимое унитарное конечномерное представление D не будет *разложено* на неприводимые унитарные представления D_j (выражаясь через их сумму). Некоторые из этих неприводимых представлений могут быть эквивалентными. Так как мы можем выбрать базисы независимо в подпространствах $\mathcal{L}_j$, они не перекрываются. В полном базисе все матрицы $D(g)$ являются *блочно-диагональными*, число блоков соответствует количеству представлений D_j.

8.12 Ортогональность и полнота*

Многие важные результаты основаны на *лемме Шура*: линейный оператор $\hat{A}$, который коммутирует со всеми матрицами $D(g)$ *неприводимого* представления группы $\mathcal{G}$, пропорционален единичному оператору в пространстве этого представления (сравните с задачей 6.8). Действительно, если $|a\rangle$ является собственным вектором $\hat{A}$ в этом пространстве, то для любого g вектор $D(g)|a\rangle$ принадлежит тому же собственному значению a из-за коммутативности $[D(g), \hat{A}] = 0$. Таким образом, подпространство $\mathcal{L}_a$ вырожденных собственных векторов $\hat{A}$ является инвариантным подпространством. Однако представление $D(g)$ является неприводимым и не может иметь нетривиальное инвариантное подпространство. Таким образом, будучи не пустым, $\mathcal{L}_a$ совпадает со всем представлением пространства. Это означает, что оно натянуто на вырожденные собственные векторы $\hat{A}$, т. е. в этом пространстве $\hat{A} = a \cdot \hat{1}$.

Любое представление D группы $\mathcal{G}$ в n-мерном пространстве $\mathcal{L}$ определяет в произвольном ортонормированном базисе $|j\rangle$ матрицу $D(g)$ в соответствии со стандартным определением матричных элементов $D_{jk}(g)$ (см. уравнение (6.54)). Можно сказать, что представление определяет n^2 функций $D_{jk}(g)$, определённых *на группе*. Эти функции не являются независимыми, так как они связаны групповым правилом умножения:

$$D_{jk}(fg) = \sum_l D_{jl}(f) D_{lk}(g). \tag{8.72}$$

Вследствие этого существуют соотношения ортогональности между матричными элементами $D_{jk}(g)$. Чтобы получить их, возьмём произвольный оператор $\hat{A}$, действующий в пространстве представления, и построим его *среднее* по группе:

$$\overline{A} \equiv \frac{1}{N} \sum_g D(g) \hat{A} D(g^{-1}). \tag{8.73}$$

Здесь N есть число элементов группы; для бесконечных групп обычно можно обобщить (8.73), заменив сумму интегралом по параметрам группы. Средний оператор $\overline{A}$ коммутирует со всеми $D(g)$. Действительно, для любого элемента группы $D(f)$

$$D(f)\overline{A} = \frac{1}{N} \sum_g D(f) D(g) \hat{A} D(g^{-1}) = \frac{1}{N} \sum_g D(fg) \hat{A} D(g^{-1}). \tag{8.74}$$

Теперь мы имеем возможность сделать замену $g' = fg$ и использовать *свойство перестановки*. Это означает, что новая переменная снова пробегает по всей группе. Это приводит к

$$D(f)\overline{A} = \frac{1}{N}\sum_{g'} D(g')\hat{A}D(g'^{-1}f) = \\ = \frac{1}{N}\sum_{g'} D(g')\hat{A}D(g'^{-1})D(f) = \overline{A}D(f). \tag{8.75}$$

Согласно лемме Шура, для любого $\hat{A}$ средний оператор (8.73) оказывается пропорционален единичному оператору,

$$\frac{1}{N}\sum_{g} D(g)\hat{A}D(g^{-1}) = c(\hat{A})\hat{1}, \tag{8.76}$$

с численным коэффициентом, зависящим от выбора $\hat{A}$. Чтобы найти этот коэффициент, возьмём след матрицы (8.76). Используя циклическую инвариантность следа, получаем

$$\frac{1}{N}\sum_{g} \mathrm{Tr}[D(g)\hat{A}D(g^{-1})] = \frac{1}{N}\sum_{g} \mathrm{Tr}\hat{A} = \mathrm{Tr}\hat{A} = c(\hat{A})\mathrm{Tr}\hat{1} = nc(\hat{A}) \tag{8.77}$$

или $c(\hat{A}) = \mathrm{Tr}\hat{A}/n$. Так как оператор $\hat{A}$ произволен, мы можем выбрать его только с одним ненулевым матричным элементом, скажем, (jk). Тогда

$$A_{pq} = \delta_{jp}\delta_{kq} \quad \rightsquigarrow \quad \mathrm{Tr}\hat{A} = \delta_{jk} \tag{8.78}$$

и il-й элемент уравнения (8.76) принимает вид

$$\frac{1}{N}\sum_{g} D_{ij}(g)D_{kl}(g^{-1}) = \frac{1}{n}\delta_{il}\delta_{jk}. \tag{8.79}$$

Для унитарного представления $D^{-1} = D^{\dagger}$, или $D_{kl}(g^{-1}) = D^{*}_{lk}(g)$, и, наконец,

$$\frac{1}{N}\sum_{g} D^{*}_{lk}(g)D_{ij}(g) \equiv (D_{lk}, D_{ij}) = \frac{1}{n}\delta_{li}\delta_{kj}. \tag{8.80}$$

Здесь мы трактуем это соотношение ортогональности как *скалярное произведение* (D_{lk}, D_{ij}) матричных элементов, рассматриваемых как функции,

определённые на группе. Количество ортогональных функций $D_{ij}(g)$ равно n^2, а максимальное число линейно независимых функций на группе из N элементов равно N. Это влечёт наличие ограничения $n^2 \leqslant N$ на размерности неприводимых представлений.

С помощью подобной конструкции используя оператор

$$\tilde{A}(1,2) = \frac{1}{N}\sum_g D^{(1)}(g)\hat{A}D^{(2)}(g^{-1}), \tag{8.81}$$

можно показать, что функции $D^{(1)}_{lk}(g)$ и $D^{(2)}_{ij}(g)$, генерируемые *неэквивалентными* неприводимыми представлениями, ортогональны в смысле скалярного произведения (8.80) и $\tilde{A}(1,2) \equiv 0$ для *1* $\neq$ *2*. Вообще, можно записать условие ортогональности для представлений α и β как

$$(D^{(\alpha)}_{lk}, D^{(\beta)}_{ij}) = \frac{1}{n_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{li}\delta_{kj}. \tag{8.82}$$

Определим *регулярное* представление $g \to \Delta(g)$ в виде набора операторов, действующих на функции $\psi(f)$, определённые на группе, согласно

$$\Delta(g)\psi(f) = \psi(fg). \tag{8.83}$$

Легко видеть, что это действительно представление:

$$\Delta(g_1)\Delta(g_2)\psi(f) = \Delta(g_1)\psi(fg_2) = \psi(fg_1g_2) = \Delta(g_1g_2)\psi(f). \tag{8.84}$$

Данное представление является N-мерным (по числу линейно независимых функций на группе), хотя, вообще говоря, приводимым. Пространство функций может быть разложено в сумму подпространств, $\alpha = 1, \ldots, r$, которые преобразуются по неприводимым представлениям $D^{(\alpha)}(g)$. Полный набор базисных функций можно будет разделить на наборы базисов $\{\psi^{(\alpha)}_1, \ldots, \psi^{(\alpha)}_{n_\alpha}\}$ размерности n_α, принадлежащих каждому из подпространств. Эти базисные функции преобразуются под действием $\Delta(g)$ согласно общему правилу (8.65),

$$\Delta(g)\psi^{(\alpha)}_j(f) = \sum_{k=1}^{n_\alpha}\psi^{(\alpha)}_k(f)\Delta_{kj}(g). \tag{8.85}$$

Однако в регулярном представлении (8.83) результат для любого f должен быть $\psi^{(\alpha)}_j(fg)$. Взяв $f = e$ (единичный элемент), мы видим, что базисные

функции на группе можно разложить в ряд

$$\psi_j^{(\alpha)}(g) = \sum_{k=1}^{n_\alpha} C_k^{(\alpha)} D_{kj}^{(\alpha)}(g), \tag{8.86}$$

где коэффициенты равны $C_k^{(\alpha)} = \psi_k^{(\alpha)}(e)$. Так как множество $\psi_j^{(\alpha)}$ является полным, любая функция на группе может быть представлена аналогичным образом. Общее количество функций, порождённых всеми неприводимыми представлениями, равно N. С другой стороны, есть n_α^2 функций в неприводимом представлении α. Это приводит к *теореме Бернсайда*: сумма квадратов размерностей всех неприводимых неэквивалентных представлений равна порядку группы,

$$n_1^2 + n_2^2 + \cdots + n_r^2 = N. \tag{8.87}$$

8.13 Характеры*

Каждый элемент g группы в представлении $D(g)$ может быть охарактеризован числом $\chi(g)$, которое инвариантно относительно выбора базиса в пространстве представления (более точное обозначение было бы $\chi_D(g)$, но мы часто будем опускать индекс D). Это число называется *характером.* Характер является следом соответствующей матрицы

$$\chi(g) = \mathrm{Tr}\{D(g)\} \tag{8.88}$$

и очевидно не зависит от базиса. Переход к любому эквивалентному представлению не меняет характера, поскольку

$$D'(g) = AD(g)A^{-1} \quad \rightsquigarrow \quad \chi'(g) = \mathrm{Tr}\{D'(g)\} = \chi(g). \tag{8.89}$$

Так как характеры являются функциями на группе, мы можем вычислить их скалярные произведения с помощью суммы (интеграла) по группе, как в (8.80) и (8.82). Элементы неэквивалентных неприводимых представлений ортогональны, и, следовательно, ортогональны и их характеры. Характеры любого неприводимого представления нормируются в соответствии с

$$(\chi, \chi) = \sum_{jk} (D_{jj}, D_{kk}) = \sum_{jk} \frac{1}{n}\, \delta_{jk}\delta_{jk} = \frac{1}{n} \sum_j \delta_{jj} = 1. \tag{8.90}$$

Для произвольной пары представлений, α и β, ортогональность характеров можно записать в виде

$$(\chi^{(\alpha)}, \chi^{(\beta)}) = \delta_{\alpha\beta}. \tag{8.91}$$

Если представление приводимо, матрицы $D(g)$ могут быть приведены к блочно-диагональному виду, где каждый блок соответствует неприводимому представлению. Кроме того, каждое неприводимое представление $D^{(\alpha)}$ может входить несколько (m_α) раз. Поскольку след полной матрицы равен сумме следов блоков, характер приводимого представления выражается как

$$\chi(g) = \sum_\alpha m_\alpha \chi^{(\alpha)}(g). \tag{8.92}$$

Здесь число m_α одинаково для всех элементов g и может быть определено из ортогональности (8.91),

$$m_\alpha = (\chi, \chi^{(\alpha)}), \tag{8.93}$$

т. е. характер χ определяет все веса m_α. Таким образом, всё приводимое представление фактически определено, кроме возможных неоднозначностей, связанных с эквивалентностью. Норма полного характера (8.92) равна

$$(\chi, \chi) = \Big(\sum_\alpha m_\alpha \chi^{(\alpha)}, \sum_\beta m_\beta \chi^{(\beta)}\Big) = \sum_\alpha m_\alpha^2. \tag{8.94}$$

Хотя характер $\chi(g)$ определён для данного элемента g группы, характеры всех сопряжённых элементов равны,

$$\chi(xgx^{-1}) = \mathrm{Tr}\{D(xgx^{-1})\} = \mathrm{Tr}\{D(x)D(g)D^{-1}(x)\} = \mathrm{Tr}\{D(g)\} = \chi(g). \tag{8.95}$$

Таким образом, на самом деле характеры фактически являются *функциями сопряжённых классов*.

Задача 8.7 [16]

а) Показать, что множество $\{T(a), S(a)\}$, где $T(a)$ — сдвиги вдоль оси $x \to x' = x + a$ при вещественном a и $S(a)$ — отражения в перпендикулярной плоскости $x = a$, образует группу преобразований оси x, при которых все расстояния остаются инвариантными. Доказать правила

умножения:

$$T(a)T(b) = T(a+b); \tag{8.96}$$
$$S(0)T(a) = T(-a)S(0); \tag{8.97}$$
$$S(a) = T(a)S(0)T^{-1}(a); \tag{8.98}$$
$$S(a)S(b) = T(2a-2b). \tag{8.99}$$

б) Разложить элементы этой группы в сопряжённые классы.

в) Найти одномерные унитарные представления группы.

г) Найти двумерное неприводимое представление $D^{(k)}$ группы с трансляциями $T(a)$, представленными диагональными матрицами $D^{(k)}[T(a)]$ с диагональными матричными элементами $\exp(\mp ika)$, где k — вещественный непрерывный параметр (волновой вектор).

д) Показать, что матрицы $D(g)$ и характеры $\chi(g)$ неприводимого представления размерности n удовлетворяют соотношению полноты

$$\frac{n}{N}\sum_{g} D(g)\chi(g^{-1}) = \mathit{1}, \tag{8.100}$$

где N является порядком группы и $\mathit{1}$ в правой части уравнения (8.100) является единичной матрицей $n \times n$.

е) Используя уравнение (8.100), показать, что матрицы $D(g)$ неприводимого представления удовлетворяют добавочным ограничениям (линейная зависимость)

$$D(g) = \frac{n}{N}\sum_{h} D(h)\chi(gh^{-1}). \tag{8.101}$$

ж) Показать, что для двумерного представления пункта (*г*), характеризуемого волновым вектором k, уравнение (8.91) даёт

$$D^{(k)}[S(a)] = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} d(kb)\cos[2k(a-b)]D^{(k)}[S(b)]. \tag{8.102}$$

Проверить это уравнение в явном виде.

з) Показать, что любые три матрицы отражения $D[S(a)]$ в одном и том же представлении $D^{(k)}$ линейно зависимы, в частности

$$D^{(k)}[S(a)] = \cos(2ka)D^{(k)}[S(0)] + \sin(2ka)D^{(k)}[S(\pi/4k)]. \tag{8.103}$$

и) Пусть собственные состояния $|\pm k\rangle$ операторов сдвига приняты в качестве базиса двумерного представления пункта (*г*). Найти собственные состояния $|s\rangle$ и собственные значения s оператора отражения $D[S(0)]$ и выразить собственные состояния $D[S(a)]$ в обоих базисах.

к) Введём оператор

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}[1 - iS(\pi/4k)], \tag{8.104}$$

который представляет собой суперпозицию прохождения и отражения в плоскости, сдвинутой от начала координат на одну восьмую длины волны. Доказать, что этот оператор унитарный и преобразует собственные состояния $|\pm k\rangle$ операторов сдвига в собственные состояния $D[S(0)]$. Найти эквивалентное представление группы (явный вид матриц $D[T(a)]$ и $D[S(a)]$), соответствующее этому преобразованию.

Задача 8.8

Пусть $\chi^{(\alpha)}(g^2)$ — характер, соответствующей квадрату элемента группы g^2 в вещественном представлении α. Вычислить его среднее по группе $(1/N)\sum_g \chi^{(\alpha)}(g^2)$. (Представление α называется *вещественным*, если все матрицы $D^{(\alpha)}(g)$ вещественны.)

Нормальные моды колебаний молекул (раздел 8.9) определяются свойствами симметрии. Для каждой нормальной моды мы должны рассматривать малые смещения $\delta\mathbf{r}_j$ ядер от их положения равновесия $\mathbf{r}_j^\circ$. Эти смещения преобразуются под действием преобразований, которые принадлежат к группе симметрии, $\delta\mathbf{r}_j \to \delta\mathbf{r}'_j$. Представление элемента группы симметрии задаётся матрицей, которая выражает новые смещения в терминах старых. Характеры (следы) определяются диагональными элементами таких матриц для каждого элемента группы.

Задача 8.9

Рассмотрим молекулу из N атомов, среди которых n атомов расположены на оси симметрии. Найти характер преобразования, соответствующего вращению $\mathcal{R}(\alpha)$ на угол α вокруг оси симметрии.

Решение.

Диагональные элементы присутствуют только для тех ядер, положения равновесия которых остаются неизменными при этом преобразовании. В частности, для вращения вокруг оси симметрии диагональные элементы появляются только для ядер с положением равновесия на этой оси. Для

оси симметрии z смещения каждого из этих n атомов преобразуются как $\delta z' = \delta z$ и

$$\delta x' = \delta x \cos\alpha + \delta_y \sin\alpha, \quad \delta y' = \delta y \cos\alpha - \delta x \sin\alpha, \tag{8.105}$$

так что сумма диагональных элементов для этих n атомов равна $n(1 + 2\cos\alpha)$. Смещения оставшихся $N - n$ атомов не дают вклада в характер, так как для того, чтобы сохранить симметрию молекулы, они должны быть переведены в положение других атомов (нет диагональных элементов). Это результат для всей молекулы, включая смещение центра масс и его общее вращение. Эти неколебательные степени свободы дают вклад $2(1 + \cos\alpha)$. В результате колебательное представление имеет характер

$$\chi(\alpha) = (n - 2)(1 + 2\cos\alpha). \tag{8.106}$$

Единичный элемент, $\alpha = 0$, даёт $\chi(0) = 3n - 6$. Но в этом случае все атомы дают вклад в диагональные элементы, так что $n = N$, и мы приходим к старому результату $3N - 6$ для общего числа нормальных колебательных мод (см. раздел 8.9).

Дополнительная литература: [41–45].

Движенье меря как живое…
Уильям Вордсворт, Прелюдия

Глава 9

Одномерное движение: континуум

9.1 Задача на собственные значения

По определению, состояние *стационарно*, если оно имеет определённую энергию E, а его эволюция во времени описывается экспоненциальной зависимостью в картине Шрёдингера,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)Et}|\psi\rangle. \tag{9.1}$$

Не зависящий от времени вектор состояния $|\psi\rangle$ является собственным вектором гамильтониана системы $\hat{H}$, а энергия E является соответствующим собственным значением,

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{9.2}$$

Любое среднее значение физической величины (без явной зависимости от времени) в стационарном состоянии не зависит от времени,

$$\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle e^{-(i/\hbar)Et}\psi|\hat{A}|e^{-(i/\hbar)Et}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \tag{9.3}$$

что является отличительной особенностью стационарности. Конечно, то же самое следует из операторных уравнений движения в картине Гейзенберга.

Для гамильтониана замкнутой системы как эрмитова оператора собственные значения, формирующие *энергетический спектр* системы, вещественны, а собственные векторы $|\psi\rangle$ составляют полный набор ортогональных состояний (напомним, что собственные состояния с различными собственными значениями автоматически ортогональны, а вырожденные состояния с одним и тем же собственным значением E могут быть ортогонализованы). Однако спектр $\{E\}$ не задан *априори*, и задача решения уравнения Шрё-

дингера фактически является задачей о нахождении собственных значений и соответствующих собственных функций гамильтониана.

Энергетический спектр может быть дискретным или непрерывным. Реальные системы обычно обладают обоими типами спектра. Состояния континуума появляются выше некоторой *пороговой* энергии возбуждения, необходимой для распада системы. Координатные собственные функции отличаются своим поведением в *асимптотической области* на больших расстояниях частицы от остальной системы. Плотность вероятности нахождения связанных состояний частиц на очень больших расстояниях падает, поэтому функции могут быть нормированы. Это граничное условие определяет энергетический спектр (см. главу 3). Фактически любая реальная система, рассматриваемая в нерелятивистской квантовой механике, имеет конечный объём. Плоские волны являются исключением, но и их можно рассматривать как предельное построение для движения в объёме, который возрастает до бесконечности. В этом пределе можно выделить два типа состояний: состояния с подлинно дискретным спектром, для которых расстояние между уровнями в этом пределе остаётся конечным, и состояния, относящиеся к континууму, которые в этом пределе могут иметь любую плотность, как мы видели в разделе 3.8 при использовании периодических граничных условий.

В этом главе мы ограничимся рассмотрением одномерного движения одной частицы в вещественном статическом потенциале $U(x)$. Проблемы с кусочно-постоянными потенциалами могут быть рассмотрены на уровне волн де Бройля, как мы это сделали в главе 2. Арсенал средств, собранных там, будет полезен и в более реальных ситуациях. Когда потенциал является гладкой функцией, а не набором постоянных фрагментов, мы приходим к дифференциальному уравнению (7.27), которое для стационарного случая и одного пространственного измерения приобретает вид

$$\hat{H}\psi(x) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right\}\psi(x) = E\psi(x). \tag{9.4}$$

При этом спектр собственных значений энергии должен определяться отбором физически приемлемых решений. Может оказаться удобным переписать это уравнение в виде (сравните с (7.33))

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\psi = 0 \tag{9.5}$$

с зависящим от координат «волновым вектором» (волновым числом),

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m[E - U(x)]}{\hbar^2}}, \tag{9.6}$$

который является вещественным в классически разрешённых областях, $E > U(x)$, и мнимым в классически запрещённых областях, $E < U(x)$.

9.2 Непрерывный спектр

Напомним ещё раз, что бесконечное движение всегда можно рассматривать как предел движения в очень большом, но конечном объёме. Средние значения $\langle \hat{F} \rangle$ физических операторов в общем случае определяются как

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{\int dx\, \psi^*(x)\hat{F}\psi(x)}{\int dx |\psi(x)|^2} \equiv \frac{1}{I} \int dx\, \psi^*(x)\hat{F}\psi(x). \tag{9.7}$$

Такие величины могут иметь конечный предел, даже если волновая функция, взятая в бесконечном объёме, не нормируема, как, например, плоская волна.

Назовём $U_{\min}$ абсолютный минимум потенциала. В любом состоянии среднее значение потенциальной энергии больше этого числа,

$$\langle U \rangle = \frac{1}{I} \int dx\, U(x)|\psi(x)|^2 \geqslant U_{\min}. \tag{9.8}$$

Среднее значение кинетической энергии всегда положительно,

$$\langle K \rangle = -\frac{1}{I}\frac{\hbar^2}{2m} \int dx\, \psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{I}\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left|\frac{d\psi(x)}{dx}\right|^2 \geqslant 0. \tag{9.9}$$

Здесь мы предположили, что оператор импульса эрмитов, поэтому его действие может быть перенесено (с помощью интегрирования по частям) на левую функцию, а значение проинтегрированного члена исчезает для любого конечного объёма в процессе предельного перехода к бесконечности. Для асимптотики плоской волны с волновым вектором k результат (9.9), естественно, равен $\hbar^2 k^2/2m$.

Объединяя уравнения (9.8) и (9.9), мы приходим к выводу, что спектр возможных энергий *ограничен снизу*,

$$E = \langle H \rangle = \langle K + U \rangle \geqslant U_{\min}. \tag{9.10}$$

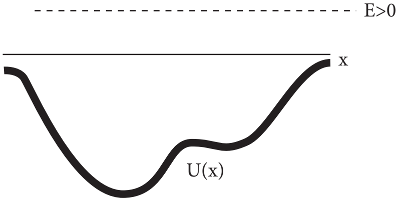

Рис. 9.1: Потенциал, исчезающий при $x \to \pm\infty$

Имея в виду этот предельный переход, в дальнейшем мы не будем явно указывать нормировочный интеграл I.

Важная информация может быть получена из уравнения непрерывности (2.11), которое в одномерном случае имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \tag{9.11}$$

где ток даётся уравнением (7.55),

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left\{\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx}\psi\right\}. \tag{9.12}$$

В стационарном состоянии плотность вероятности $\rho = |\psi|^2$ не зависит от времени и ток $j(x)$ является *постоянным* всюду,

$$\frac{dj}{dx} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad j = \text{const}. \tag{9.13}$$

Предположим, что потенциал $U(X)$ стремится к нулю снизу при $x \to \pm\infty$ (см. рис. 9.1). Тогда любое *положительное* значение энергии разрешено, так как можно поместить источник частиц далеко от потенциала в области свободного движения и создать частицы с произвольным вещественным волновым числом k и энергией $E = \hbar^2 k^2/2m$, как мы делали в простых задачах главы 2. В этой *асимптотической* области решение может содержать только падающую волну и отражённую волну, но так как энергия E всюду одинакова, отражённая волна имеет то же значение E и, следовательно, $k_{\text{ref}} = -k$. Таким образом, при x далеко влево (на стороне источника)

$$\psi(x)|_{x\to-\infty} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \tag{9.14}$$

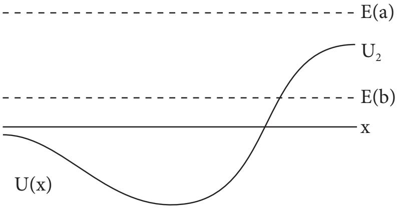

Рис. 9.2: Асимметричный потенциал: (a) энергия достаточна для прохождения; (b) случай полного отражения

где амплитуда A произвольно определяется источником, в то время как B должна определяться решением в области потенциала; без потенциала было бы $B = 0$ (нет причины для отражения).

Асимптотическая волновая функция определяет ток (9.12). Интерференционные члены сокращаются, и мы получаем *падающий* j_i и *отражённый* j_r токи с одинаковой скоростью $\hbar k/m$, но различной интенсивностью

$$j = j_i - j_r = \frac{\hbar k}{m}\Big(|A|^2 - |B|^2\Big). \tag{9.15}$$

Переходя к далёкой асимптотике справа, мы можем получить только *прошедшую* волну с тем же волновым числом,

$$\psi(x)|_{x\to+\infty} = Ce^{ikx}, \tag{9.16}$$

и соответствующий ток:

$$j_t = \frac{\hbar k}{m}\,|C|^2. \tag{9.17}$$

Теперь уравнение непрерывности (9.13) устанавливает связь между интенсивностями трёх волн,

$$|A|^2 = |B|^2 + |C|^2. \tag{9.18}$$

Эта формула эквивалентна соотношению (2.36) между коэффициентами отражения и прохождения,

$$R = \frac{j_r}{j_i}, \quad T = \frac{j_t}{j_i}, \quad R + T = 1. \tag{9.19}$$

Если предельное асимптотическое значение потенциала U_2 справа отличается от значения $U_1 = 0$ слева (см. рис. 9.2*a*), но мы всё ещё считаем $E > U_2$, то нам нужно изменить приведённые выше аргументы, поскольку прошедший ток содержит другую асимптотическую скорость частицы:

$$\psi(x)|_{x\to+\infty} = Ce^{ik'x}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E-U_2)}{\hbar^2}}, \quad j_t = \frac{\hbar k'}{m}|C|^2. \tag{9.20}$$

Теперь сохранение тока даёт

$$k\Big(|A|^2 - |B|^2\Big) = k'|C|^2, \tag{9.21}$$

что эквивалентно (9.19). Заметим, что мы используем только *асимптотические* свойства потенциала и допускаем произвольное поведение между ними. Для того чтобы найти B и C по отдельности, мы должны связать универсальные асимптотические функции с конкретным решением в области потенциала.

Теперь мы можем рассмотреть случай энергии ниже порога прохождения, $E < U_2$ (рис. 9.2*b*). Под барьером, далеко справа, волновое число мнимое, и мы должны выбрать экспоненциально *убывающее* решение,

$$\psi(x)|_{x\to+\infty} = Ce^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_2-E)}{\hbar^2}}. \tag{9.22}$$

Однако эта функция не имеет зависящей от координаты фазы (напомним раздел 7.3) и не создаёт ток, $j_t = 0$. Так как ток должен быть постоянным во всём пространстве, он равен нулю также слева, и мы имеем *полное отражение*,

$$j_r = j_i, \quad |B|^2 = |A|^2, \quad R = 1, \tag{9.23}$$

несмотря на тот факт, что волновая функция (9.22) проникает внутрь барьера.

9.3 Вырождение в континууме

Не существует ограничения на величину энергии, если она больше, чем низшее асимптотическое значение потенциала U_1; любое значение энергии $E > U_1$ разрешено, а спектр непрерывен. Существует, однако, заметное отличие между случаями $E > U_{1,2}$ и $U_2 > E > U_1$, хотя энергетический

спектр непрерывен в обоих случаях. В первом случае движение бесконечно в обоих направлениях. Мы можем начать с источника справа, который должен дать нам другое, линейно независимое, решение с той же энергией, т. е. мы имеем *двукратное вырождение*. Во втором случае движение бесконечно только влево, второе решение отсутствует и вырождения нет.

В случае дважды вырожденного бесконечного движения для того, чтобы сравнить решения с источником на противоположных сторонах от области потенциала, рассмотрим так называемый *вронскиан* (*определитель Вронского*), построенный из этих двух решений. Вронскиан двух функций $f(x)$ и $g(x)$ определяется как

$$W[f, g] = \mathrm{Det} \begin{vmatrix} f & g \\ f' & g' \end{vmatrix} = fg' - f'g, \tag{9.24}$$

где штрих означает производную d/dx. Рассмотрим два произвольных решения одномерного уравнения Шрёдингера (9.5), ψ_1 и ψ_2, с энергиями E_1 и E_2 соответственно,

$$\psi_1'' + k_1^2(x)\psi_1 = 0, \quad \psi_2'' + k_2^2(x)\psi_2 = 0, \quad k_{1,2}^2 = \frac{2m[E_{1,2} - U(x)]}{\hbar^2}. \tag{9.25}$$

Если мы умножим второе уравнение на ψ_1, первое — на ψ_2 и найдём их разность, потенциальная энергия выпадает и мы получаем

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - E_1)\psi_1\psi_2 = 0. \tag{9.26}$$

Это не что иное, как уравнение для вронскиана $W_{12} = W[\psi_1, \psi_2]$ этих двух решений,

$$\frac{dW_{12}}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - E_2)\psi_1\psi_2. \tag{9.27}$$

В частности, для двух вырожденных решений, $E_1 = E_2$, вронскиан является константой,

$$\frac{dW_{12}}{dx} = 0, \quad E_1 = E_2. \tag{9.28}$$

С вронскианом, определённым в произвольном месте, например в асимптотике, условие $W = \mathrm{const}$ является дифференциальным уравнением *первого порядка*, которое может быть использовано для нахождения второго линейно независимого решения ψ_2, если известно ψ_1.

Для вырожденной энергии в континууме решение, дополнительное к найденному ранее (см. уравнения (9.14) и (9.20)), может быть принято как имеющее асимптотику с источником справа,

$$\psi_2(x) = \begin{cases} C'e^{ik'x} + De^{-ik'x}, & x \to \infty, \\ B'e^{-ikx}, & x \to -\infty, \end{cases} \tag{9.29}$$

где D, C' и B' — амплитуды падающей, отражённой и прошедшей волн, и мы рассматриваем общий случай произвольных асимптотических значений потенциала, когда асимптотические волновые числа k и k' могут быть разными.

Задача 9.1

Доказать, что коэффициенты отражения и прохождения для источника справа, R_r и T_r, такие же, как и для источника слева, R_l и T_l.

Решение.

Вычислите вронскиан двух решений в двух асимптотических областях.

Задача 9.2

Дан чётный потенциал $U(x) = U(-x) > 0$, который спадает на больших расстояниях. Определите два фундаментальных решения уравнения Шрёдингера для энергии E, которые даются чётными и нечётными функциями $u_\pm(x) = \pm u_\pm(-x)$ со значениями в начале координат

$$u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 1; \quad u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1. \tag{9.30}$$

Пусть безразмерные логарифмические производные этих решений в точке x_0 за пределами области потенциала равны

$$\lambda_\pm = x_0 \frac{u'_\pm(x_0)}{u_\pm(x_0)}. \tag{9.31}$$

Рассмотрите рассеяние волны, идущей с одной стороны, и найдите вероятности отражения и прохождения в терминах $\lambda_\pm$. Это даёт удобный подход к численному решению задачи.

Решение.

Возьмём решение $u(x)$, которое состоит из падающей и отраженной волны слева, прошедшей волны справа и комбинации двух базисных вещественных

решений между ними,

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & -\infty < x \leqslant -x_0, \\ C_+u_+(x) + C_-u_-(x), & -x_0 \leqslant x \leqslant x_0, \\ Fe^{ikx}, & x_0 \leqslant x < \infty, \end{cases} \tag{9.32}$$

где $E = \hbar^2k^2/2m$. Сшивая решения при $x = \pm x_0$ и учитывая свойства симметрии базисных решений и их вронскиана $W(u_+, u_-) = 1$, находим

$$\begin{aligned} B &= -\frac{1}{2}\left[\frac{\lambda_+ + iq}{\lambda_+ - iq} + \frac{\lambda_- + iq}{\lambda_- - iq}\right] e^{-2iq}, \\ F &= -\frac{1}{2}\left[\frac{\lambda_+ + iq}{\lambda_+ - iq} - \frac{\lambda_- + iq}{\lambda_- - iq}\right] e^{-2iq}, \end{aligned} \tag{9.33}$$

где $q = kx_0$. В терминах фаз $\alpha_\pm$, определяемых как $\exp(i\alpha_\pm) = (\lambda_\pm + iq)/(\lambda_\pm - iq)$, коэффициент прохождения даётся

$$T = |F|^2 = \frac{q^2(\lambda_+ - \lambda_-)^2}{(q^2 + \lambda_+^2)(q^2 + \lambda_-^2)} = \frac{1 - 2\cos(\alpha_+ - \alpha_-)}{2}. \tag{9.34}$$

Коэффициент отражения равен

$$R = |B|^2 = \frac{1 + 2\cos(\alpha_+ - \alpha_-)}{2}. \tag{9.35}$$

9.4 Матрица перехода

Общее решение уравнения Шрёдингера в дважды вырожденном континууме представляет собой суперпозицию ранее рассмотренных случаев для источника, расположенного слева и справа. В этом решении у нас есть четыре асимптотических амплитуды:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x \to -\infty, \\ Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, & x \to \infty. \end{cases} \tag{9.36}$$

При заданных коэффициентах A и B мы однозначно определяем решение дифференциального уравнения во всём пространстве. Более того, из линейности уравнения следует, что амплитуды C и D являются *линейными* функциями A и B. Эта взаимосвязь может быть записана с помощью *мат-*

рицы перехода M, которая кодирует решение в виде линейной зависимости «выход-вход» двухкомпонентного набора на выходе от двухкомпонентного набора на входе,

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} \alpha & \alpha' \\ \beta & \beta' \end{pmatrix}. \tag{9.37}$$

Некоторые свойства матрицы перехода могут быть установлены с помощью общих рассуждений. Важное ограничение на матрицу M продиктовано требованием *инвариантности относительно обращения времени*, которое выполняется для вещественного потенциала. Обращение времени (см. раздел 8.1) эквивалентно комплексному сопряжению в сочетании с обменом ролями волн, бегущих направо и налево. Тогда матрица преобразования должна быть той же самой. Эта операция даёт

$$A \to B^*, \quad B \to A^*, \quad C \to D^*, \quad D \to C^*. \tag{9.38}$$

Таким образом, для обращённой системы

$$\begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \alpha' \\ \beta & \beta' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix}. \tag{9.39}$$

Сравнивая это уравнение с комплексно сопряжённым к уравнению (9.37) и требуя, чтобы они тождественно совпадали для любых A и B, находим

$$\beta' = \alpha^*, \quad \alpha' = \beta^*, \quad M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix}. \tag{9.40}$$

Теперь примем во внимание сохранение тока. По аналогии с (9.21) это даёт

$$k\Big(|A|^2 - |B|^2\Big) = k'\Big(|C|^2 - |D|^2\Big). \tag{9.41}$$

Теперь мы можем выразить C и D через A и B, используя матрицу перехода (9.40), в результате чего получим

$$k\Big(|A|^2 - |B|^2\Big) = k'\Big(|\alpha|^2 - |\beta|^2\Big)\Big(|A|^2 - |B|^2\Big) \tag{9.42}$$

и окончательно —

$$\Big(|\alpha|^2 - |\beta|^2\Big) = \operatorname{Det} M = \frac{k}{k'}. \tag{9.43}$$

Задача 9.3

Доказать утверждение задачи 9.1, используя свойства матрицы перехода.

Задача 9.4

Рассмотреть случай симметричного барьера ($k' = k$) и найти *матрицу рассеяния* S, которая связывает падающую и выходящую волны,

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}. \tag{9.44}$$

Показать, что эта матрица *унитарна*,

$$SS^{\dagger} = S^{\dagger}S = 1. \tag{9.45}$$

Решение.

С помощью матрицы (9.40) с $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$ получаем

$$S = \frac{1}{\alpha^*} \begin{pmatrix} -\beta^* & 1 \\ 1 & \beta \end{pmatrix}. \tag{9.46}$$

Унитарность S-матрицы выражает закон сохранения вероятности, в данном случае — при упругом рассеянии (включая отражение и прохождение).

9.5 Время задержки

Сохранение тока определяет только абсолютные значения амплитуд в процессах отражения и прохождения. Однако информация, даваемая решением уравнения Шрёдингера, не ограничивается только этим, так как волновая функция при наличии тока является комплексной. Обсудим кратко физический смысл фаз отражённой и прошедшей волн.

Рассмотрим отражение или прохождение падающего волнового пакета (см. раздел 5.4) с амплитудой $A(k)$, которая отлична от нуля в узком интервале волновых векторов. Для каждой монохроматической компоненты мы можем найти амплитуды отражения, $B(k)$, и прохождения, $C(k')$. Хотя первоначальная амплитуда $A(k)$ может быть взята вещественной, прошедшая амплитуда комплексна и содержит фазу $\delta(k')$ (не путать с дельта-функцией). Эта разность фаз, по сравнению со свободным движением, приобретается в результате изменения условий распространения в области

потенциала. Соответствующая часть волнового пакета с его зависимостью от времени может быть записана в асимптотической области как

$$\Psi_t(x,t) = \int \frac{dk'}{2\pi} |C(k')| e^{ik'x + i\delta(k') - (i/\hbar)E(k')t}. \tag{9.47}$$

Вблизи центра тяжести пакета k'_0 фазовый множитель в подынтегральном выражении можно записать в виде

$$\frac{i}{\hbar}\left[\hbar k'_0 x - E(k'_0)t\right] + i\delta(k'_0) + i(k' - k_0)\left[x - \frac{dE}{\hbar\, dk'}t + \frac{d\delta}{dk'}\right]. \tag{9.48}$$

Так как $dE = \hbar^2(k'/m)dk' = \hbar v'\, dk'$, центр тяжести прошедшего пакета (который определяется по стационарной фазе, когда соседние компоненты интерферируют конструктивно) движется согласно (см. последний член в (9.48))

$$x - v'\left[t - \hbar\left(\frac{d\delta}{dE}\right)_{E=E(k'_0)}\right] = 0. \tag{9.49}$$

Мы пришли к выводу, что производная фазы $\delta(E)$ по энергии определяет *время задержки* волновых пакетов по сравнению со свободным движением

$$\tau = \hbar\frac{d\delta}{dE}. \tag{9.50}$$

Отрицательное τ означает ускорение движения.

Задача 9.5

Определить время задержки волны, отражённой от барьера конечной высоты U_0 (см. раздел 2.5).

Решение.

Удобно использовать (2.46) и тот факт, что $|B| = 1$ (при $A = 1$). Также введём вспомогательный угол θ, который определяется как

$$\cos\theta = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{E}{U_0}}, \quad \sin\theta = \frac{\kappa}{k_0}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}. \tag{9.51}$$

Тогда из (2.49)

$$B = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} = \frac{k^2 - \kappa^2 - 2ik\kappa}{k_0^2} = \cos(2\theta) - i\sin(2\theta) = e^{-i2\theta}. \tag{9.52}$$

Это означает, что фаза отражённой волны равна $\delta_r = -2\theta$, и, вычисляя $d\theta/dE$, получаем время задержки

$$\tau_r = 2\hbar \frac{d\theta}{dE} = \frac{\hbar}{\sqrt{E(U_0 - E)}} = \frac{2m}{\hbar k \kappa} = \frac{2}{\kappa v}, \tag{9.53}$$

где $v = \hbar k/m$ является классической скоростью частицы.

Задача 9.6

Определить время задержки для волн, отражённых от барьера конечной длины a, и для волн, прошедших через этот барьер, при энергиях ниже высоты барьера (см. раздел 2.6).

Решение.

Используя тот же угол θ, что в уравнении (9.51), амплитуды из задачи 2.4 можно записать в виде

$$B = -e^{-i\xi} \frac{1}{f} \Big(1 - e^{-2\kappa a}\Big), \tag{9.54}$$

$$C = -e^{i(\theta - \xi)} \frac{2}{f} \cos\theta, \quad D = e^{-i(\theta + \xi)} \frac{2}{f} \cos\theta \, e^{-2\kappa a}, \tag{9.55}$$

$$F = -ie^{-i(ka + \xi)} \frac{2}{f} \sin(2\theta) \, e^{-\kappa a}, \tag{9.56}$$

где

$$f = \sqrt{1 - 2e^{-2\kappa a} \cos(4\theta) + e^{-4\kappa a}} \tag{9.57}$$

и

$$\tan\xi = \coth(\kappa a) \tan(2\theta). \tag{9.58}$$

В пределе малой проницаемости барьера, $\kappa a \gg 1$, мы имеем $\xi \to 2\theta$, и время задержки как отражённой, так и прошедшей волны совпадает с тем, которое было найдено в (9.53).

Результат (9.53) является неожиданным: в пределе $\kappa a \gg 1$ время задержки при туннелировании не зависит от ширины a барьера! Этот странный результат в течение длительного времени был предметом дискуссий. Понятый буквально он эквивалентен наличию сколь угодно высоких (даже сверхсветовых) скоростей в процессе квантового туннелирования. Тем не менее можно заметить, что весь вывод времени задержки (9.50) сделан

в предположении, что реальная амплитуда волнового пакета, $|C(k')|$ в уравнении (9.47), является гладкой функцией энергии, которая может быть просто взята в центре тяжести $k = k_0$, не давая вклада в стационарную фазу. Это предположение несправедливо в случае барьера с очень низкой проницаемостью, $\kappa a \gg 1$. Здесь барьерный фактор $\exp(-\kappa a)$ является функцией с резкой зависимостью от мнимого волнового числа. Прошедший волновой пакет оказывается сильно отличающимся от падающего и отражённого. Принимая барьерный фактор во внимание при вычислении фазы (9.48), мы приходим к *комплексному* выражению

$$\tau = \hbar \left[\frac{d\delta}{dE} + ia \frac{d\kappa}{dE} \right] = \frac{1}{\kappa} \left(\frac{2}{v} - i \frac{am}{\hbar} \right). \tag{9.59}$$

Грубо говоря, «туннелирование происходит в мнимом времени». Для очень широкого барьера стационарная точка перемещается дальше в плоскости комплексного времени. Очевидно, что второй член в (9.59) связан с неопределённостью скорости под барьером, $\Delta v \sim \hbar/ma$. Если пытаться отслеживать движение внутри барьера, то условия локализации приводят к $\Delta x \ll a$ и $\Delta p \gg \hbar/a$.

9.6 Однородное поле

В качестве важного примера рассмотрим движение заряженной частицы в постоянном однородном электрическом поле $\mathcal{E}$ (рис. 9.3).

Потенциальная энергия равна $U(x) = -e\mathcal{E}x$, где e — заряд частицы, стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E + e\mathcal{E}x)\psi = 0. \tag{9.60}$$

Энергетический спектр является непрерывным и не вырожденным, а свободное движения возможно только с одной стороны. Также напомним, что это один из исключительных случаев, когда центр тяжести волнового пакета движется вдоль классической траектории (задача 7.7). В этой задаче удобно перейти к импульсному представлению через стандартное преобразование Фурье (раздел 4.1):

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)px} \varphi(p), \quad \varphi(p) = \int dx\, e^{-(i/\hbar)px} \psi(x). \tag{9.61}$$

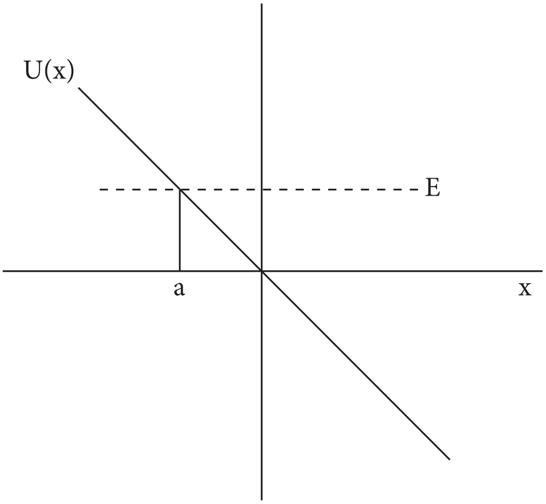

Рис. 9.3: Одностороннее движение заряженной частицы в постоянном однородном электрическом поле в предположении $e\mathcal{E} > 0$

Потенциальная энергия становится линейной функцией от $\hat{x} = i\hbar(d/dp)$, а уравнение, которое следует решить, — дифференциальным уравнением *первого порядка* по переменной p,

$$i\hbar e\mathcal{E}\,\frac{d\varphi}{dp} = \left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\varphi. \tag{9.62}$$

Решение этого уравнения очевидно:

$$\varphi(p; E) = Ce^{-(i/\hbar e\mathcal{E})[(p^3/6m)-Ep]}. \tag{9.63}$$

Легко проверить, что собственные функции для различных энергий ортогональны. Мы можем положить $C = (e\mathcal{E})^{-1/2}$ для всех E, чтобы получить обычную нормировку:

$$\begin{aligned}&\int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,\varphi^*(p, E')\varphi(p, E) = \\ &= \frac{1}{e\mathcal{E}}\int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,e^{(i/\hbar e\mathcal{E})[(p^3/6m)-Ep]}\,e^{-(i/\hbar e\mathcal{E})[(p^3/6m)-E'p]} = \delta(E - E').\end{aligned} \tag{9.64}$$

Здесь p является «координатой» волновой функции, в то время как E, изменяясь от $-\infty$ до ∞, является квантовым числом, идентифицирующим состояние. Мы можем проверить полноту (см. уравнение (3.16)) этого

набора функций:

$$\int dE\varphi(p;E)\varphi^*(p';E) = e^{(i/\hbar e\mathcal{E})(p'^3-p^3)/(6m)} \int \frac{dE}{e\mathcal{E}}\, e^{(i/\hbar e\mathcal{E})(p-p')E} = \\ = 2\pi\hbar\delta(p-p'), \tag{9.65}$$

где фактор $2\pi\hbar$ соответствует нашему определению интегралов по импульсному пространству.

Теперь мы можем найти координатную волновую функцию (9.61):

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{e\mathcal{E}}} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)[p(x-a)-p^3/(6me\mathcal{E})]}, \tag{9.66}$$

где $a = -E/(e\mathcal{E})$ – классическая точка поворота при энергии E (рис. 9.3). Как видно из уравнения (9.60), $\psi_E(x)$ зависит от координаты и энергии в комбинации $x - a$, т. е. различные энергии приводят к одинаковому поведению на соответствующем расстоянии от точки поворота. Вводя безразмерный импульс

$$\eta = \frac{p}{b\hbar}, \quad b = \left(\frac{2me\mathcal{E}}{\hbar^2}\right)^{1/3} \tag{9.67}$$

и безразмерную координату, измеренную в единицах длины волны $1/b$,

$$\xi = b(x-a), \tag{9.68}$$

мы находим волновую функцию в интегральной форме

$$\psi(\xi) = \frac{b}{\sqrt{e\mathcal{E}}} \int \frac{d\eta}{2\pi}\, e^{i[\eta\xi - \eta^3/3]}. \tag{9.69}$$

Обратите внимание, что полученная функция является *вещественной*. Это говорит нам, что ток вероятности равен нулю, как и следовало ожидать при полном отражении от барьера, даже если волна проникает в запрещённую область $\xi < 0$.

9.7 Функция Эйри и функции Бесселя*

Функция Эйри определяется как

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\eta \cos\left(\frac{\eta^3}{3} + \eta\xi\right). \tag{9.70}$$

Переходя в (9.69) к интегралу по положительным значениям η, получаем

$$\psi(\xi) = \frac{b}{\sqrt{e\mathcal{E}}}\,\mathrm{Ai}(-\xi). \tag{9.71}$$

Функция Эйри связана с широким классом *цилиндрических функций*, которые часто встречаются в приложениях. Это хороший пример, где мы можем получить математические знания, чтобы использовать их позже для квазиклассического приближения.

Как видно из уравнения (9.60) и подстановок (9.67) и (9.68), волновая функция $\psi(\xi)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi\,\psi = 0, \tag{9.72}$$

где $\xi = 0$ является точкой поворота, область $\xi > 0$ соответствует классически разрешённому движению и $\xi < 0$ области под барьером. Как всегда, это уравнение имеет два линейно независимых решения, а физическим решением является их определённая комбинация, $\mathrm{Ai}(-\xi)$. В точке поворота функция Эйри и её производная имеют конечные значения, которые могут быть вычислены [46] непосредственно, если положить $\xi = 0$ в определении (9.70),

$$\mathrm{Ai}(0) = \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)}, \quad \left(\frac{d}{d\xi}\,\mathrm{Ai}(-\xi)\right)_{\xi=0} = \frac{3^{-4/3}}{\Gamma(4/3)}. \tag{9.73}$$

Результат выражается через Гамма-функции, которые имеют значения $\Gamma(2/3) \approx 1.354$ и $\Gamma(4/3) = (1/3)\Gamma(1/3) \approx 0.893$. Эти числа задают определённую комбинацию, которую нам нужно найти.

Если мы введём новую переменную z таким образом, что $z = (2/3)\xi^{3/2}$ (позже мы увидим причину этой замены переменной), и новую функцию

$$C(z) = \left[\frac{\psi(\xi)}{\sqrt{\xi}}\right]_{\xi=(3/2)z^{2/3}}, \tag{9.74}$$

то после простых алгебраических преобразований получим дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2C}{dz^2} + \frac{1}{z}\,\frac{dC}{dz} + \left(1 - \frac{1}{9z^2}\right)C = 0. \tag{9.75}$$

Это конкретный случай уравнения для цилиндрических функций (так называемых *функций Бесселя*) $J_\nu(z)$,

$$\frac{d^2J_\nu}{dz^2}+\frac{1}{z}\frac{dJ_\nu}{dz}+\left(1-\frac{\nu^2}{z^2}\right)J_\nu=0, \tag{9.76}$$

где ν — произвольный вещественный или комплексный параметр. Наша функция $C(z)$ соответствует $\nu = \pm 1/3$. Будем искать решение уравнения (9.76) в виде ряда. Для начала рассмотрим окрестность точки $z = 0$, которая является *особой точкой* для коэффициентов. В последнем члене мы можем пренебречь 1 по сравнению с ν^2/z^2, если $\nu \neq 0$. Это приводит к *уравнению Эйлера*, где все члены имеют одно и то же степенное поведение $J_\nu(z) \propto z^\gamma$. Тогда уравнение определяет $\gamma = \pm\nu$ и, соответственно, два решения, ведущие себя как $z^{\pm\nu}$ в начале координат.

Для определенного знака ν мы можем найти весь ряд

$$J_\nu(z)=\sum_{n=0}^{\infty} z^{\nu+n}b_n. \tag{9.77}$$

Чтобы удовлетворить уравнению, коэффициенты должны быть взаимосвязаны,

$$b_{n+2}(n+2)(2\nu+n+2)+b_n=0. \tag{9.78}$$

Это *двухчленное рекуррентное соотношение* показывает, что начиная с $n = 0$, мы получаем только чётные n или, полагая $n = 2k$ и $a_k = b_{2k}$,

$$a_{k+1}=-\frac{a_k}{4(k+1)(\nu+k+1)}. \tag{9.79}$$

С помощью рекуррентного соотношения для гамма-функции (обобщение факториала для нецелого аргумента)

$$\Gamma(x+1)=x\Gamma(x) \tag{9.80}$$

мы приходим к решению уравнения (9.79):

$$a_k=(-)^k\,\frac{a_0}{2^{2k}\Gamma(k+1)\Gamma(k+\nu+1)} \tag{9.81}$$

и с обычным выбором общего множителя $a_0 = 2^{-\nu}$ получаем стандартное определение функций Бесселя:

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-)^k (z/2)^{\nu+2k}}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\nu+1)}. \tag{9.82}$$

Если ν не является целым числом, две функции $J_{\pm\nu}$ линейно независимы, как можно видеть из их поведения вблизи начала координат. Тогда общее решение уравнения (9.76) является их линейной комбинацией,

$$C_\nu(z) = AJ_\nu(z) + BJ_{-\nu}(z). \tag{9.83}$$

Возвращаясь к исходной переменной ξ и приравнивая коэффициенты в формуле (9.83) к значениям (9.73) в начале координат, мы выразим функцию Эйри и тем самым решение для $\psi(\xi)$ квантовой задачи (уравнение (9.71)) через функции Бесселя:

$$\mathrm{Ai}(-\xi) = \frac{\sqrt{\xi}}{3}\left[J_{1/3}\left(\frac{2}{3}\xi^{2/3}\right) + J_{-1/3}\left(\frac{2}{3}\xi^{2/3}\right)\right]. \tag{9.84}$$

Если же $\nu = n$ является целым числом, мы не можем найти два линейно независимых решения таким методом. Действительно, решение с $\nu = -n$ по существу та же функция, что и J_n, поскольку n первых членов ряда (9.82) исчезают, потому что гамма-функции в знаменателе имеет полюса и ряд фактически начинается с $k = n$. Тогда после переименования $k - n = l$ мы сразу видим, что

$$J_{-n}(z) = (-)^n J_n(z). \tag{9.85}$$

Это означает, что для целого ν мы должны искать второе независимое решение. Мы сделаем это позже в соответствующем месте курса.

Задача 9.7

Вычислить определитель Вронского $W[J_v, J_{-\nu}]$.

Решение.

Используя метод раздела 9.3, получаем, что для любых двух цилиндрических функций $C_1(z)$ и $C_2(z)$

$$W[C_1, C_2] = \frac{\text{const}}{z}, \tag{9.86}$$

где константа зависит от выбора решений $C_{1,2}$. Сравнение рядов (9.82) для индексов $\pm\nu$ показывает, что при $C_1 = J_\nu$ и $C_2 = J_{-\nu}$

$$\text{const} = -\frac{2\nu}{\Gamma(\nu+1)\Gamma(1-\nu)}. \tag{9.87}$$

Используя тождества (9.80) и

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)}, \tag{9.88}$$

которые следуют из определения гамма-функции,

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt\, e^{-t} t^{x-1}, \tag{9.89}$$

мы находим

$$W[J_v(z), J_{-\nu}(z)] = -\frac{2\sin(\nu\pi)}{\pi z}. \tag{9.90}$$

Для целых ν определитель Вронского равен нулю, что указывает на линейную зависимость J_n и J_{-n}.

9.8 Асимптотическое поведение*

Теперь наша цель заключается в том, чтобы установить поведение функции Эйри в *асимптотической области*, что означает достаточно далёкой от точки поворота. Мы используем этот пример, чтобы дать представление об асимптотических свойствах решений дифференциальных уравнений, выраженных через различные *специальные функции* [47]. Общий подход восходит к *Лапласу*, а конкретная форма *метода наискорейшего спуска* — к *Риману*.

Как правило, задача может быть сведена к исследованию интегрального представления следующего типа:

$$I(\xi) = \int dz f(z;\xi), \tag{9.91}$$

где мы интересуемся поведением $I(\xi)$ при больших значениях параметра ξ; пределы интегрирования также могут зависеть от ξ. Когда $\xi \to \infty$, часто может заметить, что основной вклад в интеграл происходит от областей

вблизи определенных точек z_i. Тогда мы можем изучить поведение функции $f(z)$ в этих областях, сделать замену в интеграле, соответствующую упрощённым выражениям, и вычислить интеграл.

Задача 9.8

Найти асимптотическое поведение при $\xi \to \infty$ интеграла

$$I(\xi) = \int_0^{z_0} dz\, e^{-z\xi} f(z), \tag{9.92}$$

если функция $f(z)$ не имеет особенностей внутри интервала интегрирования, включая $z = z_0$, а вблизи начала координат её основной член равен z^ν, так что она может быть представлена в виде ряда $z^\nu(b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + \dots)$ аналогично функции Бесселя (9.82).

Решение.

В пределе $\xi \to \infty$ и $z > 0$, $\exp(-z\xi)$ становится очень малой за исключением окрестности $z = 0$. Эта окрестность, которая сокращается при увеличении ξ, определяет основной вклад в интеграл. Так как мы знаем поведение подынтегральной функции в этой области, то можем выполнить интегрирование почленно и получить асимптотику интеграла. Первый шаг даёт

$$I(\xi) \approx \int_0^{z_0} dz\, e^{-z\xi}(b_0 z^\nu + b_1 z^{\nu+1} + \dots). \tag{9.93}$$

Конечно, разложение строго справедливо только в некоторой окрестности от начала координат, поэтому вместо z_0 мы должны были бы установить некоторый предел z'. Однако поскольку основной вклад в интеграл так или иначе происходит от очень маленьких z, мы расширяем интегрирование до бесконечности, допуская погрешность менее $\exp(-z'\xi)$. Вспоминая определение гамма-функции (9.89), получаем

$$I(\xi) \approx b_0 \frac{\Gamma(\nu+1)}{\xi^{\nu+1}} + b_1 \frac{\Gamma(\nu+2)}{\xi^{\nu+2}} + \dots. \tag{9.94}$$

Мы имеем право продолжить ряд, так как отброшенная часть экспоненциально мала по сравнению с членами ряда.

Таким же образом мы можем показать, что в аналогичном интеграле,

$$I(\xi) = \int_a^b dz\, e^{\xi g(z)} f(z), \tag{9.95}$$

асимптотическое поведение при $\xi \to \infty$ определяется вкладами точек $z = z_m$, где функция $g(z)$ имеет максимумы.

Задача 9.9

Получите *формулу Стирлинга* для асимптотики гамма-функции (9.89) при $x \to \infty$,

$$\Gamma(x+1) \sim \sqrt{2\pi x}\, x^x\, e^{-x}. \tag{9.96}$$

Решение.

Для $\Gamma(x+1)$ соответствующая функция $g(x) = -z + x\ln(z)$ имеет максимум, $dg/dz = 0$, в точке $z = x$. В непосредственной близости от этой точки

$$g(z) \approx -x + x\ln(x) - \frac{1}{2x}(z-x)^2. \tag{9.97}$$

Тогда при больших x

$$\Gamma(x+1) \approx e^{-x+x\ln(x)} \int dz\, e^{-(z-x)^2/2x}. \tag{9.98}$$

Оставшийся интеграл (9.98) может быть продолжен до бесконечности, что даёт распределение Гаусса с шириной $\sigma = \sqrt{x}$. Интеграл Гаусса приводит к формуле Стирлинга (9.96). Теперь мы можем проверить, что получится от следующего члена разложении (9.97):

$$\frac{1}{6}(z-x)^3 \left(\frac{d^3 g}{dx^3}\right)_{z=x} = \frac{(z-x)^3}{3x^2}. \tag{9.99}$$

Функция Гаусса в подынтегральном выражении фактически ограничивает интегрирование шириной $|z-x| \sim \sqrt{x}$, так что поправка (9.99) добавляет вклад порядка $\exp[1/(3\sqrt{x})]$, который в пределе больших x не изменяет асимптотики (9.96). Напомним, что для целых n $\Gamma(n+1) = n!$.

9.9 Асимптотика функции Эйри*

Приобретя некоторый опыт работы с асимптотиками, возвратимся теперь к асимптотике функции Эйри, через которую выражено решение задачи о движении в однородном поле (9.71). Из общих соображений мы ожидаем,

что приближённое решение имеет вид осциллирующей функции в *классически разрешённой* области, $x > a$ или $\xi > 0$, (уравнение (9.68)), что соответствует большим отрицательным аргументам функции $\mathrm{Ai}(-\xi)$. В *классически запрещённой* области далеко под барьером, $x < a$ или $\xi < 0$, аргумент функции Эйри — большая положительная величина, и здесь волновая функция, как ожидается, экспоненциально затухает. Обратите внимание, что функция Эйри не имеет особенности в точке поворота $x = a$, или $\xi = 0$ (уравнение (9.73)). Для дальнейшего анализа удобно представить функцию Эйри (9.70) в виде действительной части экспоненциальной функции:

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\left\{\int_0^\infty d\eta e^{-i(\xi\eta+\eta^3/3)}\right\}, \tag{9.100}$$

выбор знака в показателе не имеет значения. В классически разрешённой области мы имеем $-\xi \gg 1$, т. е. $\xi = -|\xi|$, $|\xi| \gg 1$,

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\left\{\int_0^\infty d\eta e^{i(|\xi|\eta-\eta^3/3)}\right\}. \tag{9.101}$$

Точка *стационарной фазы* даётся максимумом показателя степени

$$\frac{d}{d\eta}\left(|\xi|\eta - \frac{\eta^3}{3}\right) = |\xi| - \eta^2 = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \eta = \sqrt{|\xi|}. \tag{9.102}$$

Это действительно максимум, так как вторая производная отрицательна,

$$\frac{d^2}{d\eta^2}\left(|\xi|\eta - \frac{\eta^3}{3}\right) = -2\eta. \tag{9.103}$$

Окрестность этого максимума даёт основной вклад в интеграл, если $|\xi| \gg 1$. Полагая $\eta = \sqrt{|\xi|}+\eta'$ и раскладывая экспоненту до членов второго порядка по η', мы получаем

$$|\xi|\eta - \frac{\eta^3}{3} \approx \frac{2}{3}\,|\xi|^{3/2} - \sqrt{|\xi|}\,\eta'^2. \tag{9.104}$$

В интеграле (9.101) нижний предел равен $\eta' = -\sqrt{|\xi|}$; в асимптотике мы можем заменить его на $-\infty$, тогда получим

$$\mathrm{Ai}(\xi) \approx \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\left\{e^{i(2/3)|\xi|^{3/2}}\int_{-\infty}^\infty d\eta'\, e^{-i\sqrt{|\xi|}\,\eta'^2}\right\}. \tag{9.105}$$

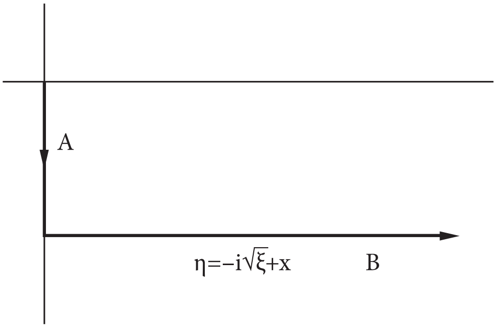

Рис. 9.4: Контур интегрирования для асимптотики функции Эйри $\mathrm{Ai}(\xi)$ при $\xi \gg 1$

Последний интеграл гауссовского типа (хотя показатель и осциллирует), он равен $(-i\pi)^{1/2}|\xi|^{-1/4}$. Наконец, беря вещественную часть комплексного показателя и возвращаясь к $-\xi$ вместо $|\xi|$, мы получаем искомую асимптотику:

$$\mathrm{Ai}(\xi) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}(-\xi)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad -\xi \gg 1. \tag{9.106}$$

Это осциллирующее поведение с медленно уменьшающейся амплитудой соответствует нашим ожиданиям распространения волны в классически разрешённой области.

При большом положительном $\xi \gg 1$ стационарные точки показателя экспоненты в интеграле (9.100) даются формулой $\eta^2 = -\xi$. Интеграл (9.100) при $\xi > 0$ сходится, если $\mathrm{Im}(\eta) < 0$. Поэтому мы можем деформировать контур интегрирования в нижнюю часть комплексной плоскости η (см. рис. 9.4). Новый контур содержит вертикальный участок A вдоль мнимой оси вниз от начала координат до стационарной точки $\eta = -i\sqrt{\xi}$ и горизонтальную часть B от стационарной точки до ∞. Вдоль линии A, где $\eta = -iy$ и y меняется от 0 до $\sqrt{\xi}$, вклад в интеграл чисто мнимый, и поэтому он не даёт вклада в асимптотику. В оставшемся интеграле B мы можем положить $\eta = -i\sqrt{\xi}+x$, где x изменяется от 0 до ∞ и экспонента может быть записана как $\exp\{F(x;\xi)\}$, где

$$F(x;\xi) = -i\xi(-i\sqrt{\xi}+x) - i\frac{(-i\sqrt{\xi}+x)^3}{3} = -\frac{2}{3}\xi^{3/2} - \sqrt{\xi}\,x^2 - \frac{i}{3}x^3. \tag{9.107}$$

Для больших ξ гауссовский член $-\sqrt{\xi}x^2$ эффективно обрезает диапазон значений x, который даёт вклад в интеграл при малом $x \sim \xi^{-1/4}$. Тогда по-

следний член в (9.107) имеет порядок $\xi^{-3/4} \ll 1$. Пренебрегая этим членом в асимптотике, мы приходим к гауссовскому интегралу по x; стандартное вычисление даёт

$$\mathrm{Ai}(\xi) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}\xi^{1/4}}\, e^{-(2/3)\xi^{3/2}}, \quad \xi \gg 1, \tag{9.108}$$

что объясняет выбор переменных в уравнении (9.74). Как и ожидалось, мы получили решение, экспоненциально спадающее в классически запрещенную область.

Задача 9.10

Введём классический импульс в разрешённой области для движения в однородном поле, $x > a$,

$$p(x) = \sqrt{2m(E + e\mathcal{E}x)} = \sqrt{2me\mathcal{E}(x-a)}, \tag{9.109}$$

и мнимый импульс в запрещённой области $x < a$, где

$$|p(x)| = \sqrt{2m(-E - e\mathcal{E}x)} = \sqrt{2me\mathcal{E}(a-x)}. \tag{9.110}$$

Показать, что асимптотика волновой функции (9.71) может быть выражена как

$$\psi_E(x) \approx 2\frac{A}{\sqrt{p(x)}}\cos\Big(\varphi(x) - \pi/4\Big), \quad x \gg a, \tag{9.111}$$

где A является нормировочной константой и

$$\psi_E(x) \approx Ae^{-\tilde{\varphi}(x)}, \quad x \ll a, \tag{9.112}$$

где фаза свободного движения в разрешённой области равна

$$\varphi(x) = \frac{1}{\hbar}\int_a^x dx' p(x'), \tag{9.113}$$

в то время как затухание волновой функции в запрещённой области определяется мнимой фазой

$$\tilde{\varphi}(x) = \frac{1}{\hbar}\int_x^a dx' |p(x')|. \tag{9.114}$$

Решение.

Используйте асимптотику функции Эйри и простые интегралы

$$\begin{aligned}
&\int_a^x dx' p(x') = \frac{2\sqrt{2m}}{3e\mathcal{E}}(E + e\mathcal{E}x)^{3/2}, \\
&\int_x^a dx' |p(x')| = -\frac{2\sqrt{2m}}{3e\mathcal{E}}(-E - e\mathcal{E}x)^{3/2}.
\end{aligned} \tag{9.115}$$

Асимптотика (9.111) состоит из падающей и отражённой волн одинаковой амплитуды (ток должен сохраняться), полученной при $p(x) \to -p(x)$, т. е. при дополнительной фазе π. Затухающая волновая функция в запрещённой области является, в сущности, той же волной с дополнительной фазой $\pi/2$ или $p(x) \to i|p(x)|$ Наличие фазы $\pi/4$ в распространяющихся волнах (9.111) связано с плавным поведением в области вблизи точек поворота, которая не содержит никаких особенностей, но не описывается асимптотическими выражениями. Точно решаемая задача в однородном поле служит опорной точкой в общем квазиклассическом рассмотрении (см. главу 15).

9.10 Функция Грина для одномерного рассеяния

Здесь мы разовьём регулярный метод решения уравнения Шрёдингера в континууме, а позже обобщим этот подход для решения трёхмерных задач. Значение этого метода состоит в возможности построения последовательности приближений для случаев, когда точное решение недостижимо. Уравнение, которое нужно решить, имеет стандартный вид (9.5), где

$$k^2(x) = k_0^2 - V(x), \quad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad V(x) = \frac{2mU(x)}{\hbar^2}. \tag{9.116}$$

Будем считать, что потенциал $V(x)$ сосредоточен на конечном отрезке оси x и может быть полностью проигнорирован при $|x| > a$, где a можно назвать *радиусом действия* потенциала, так что за пределами этого интервала $V = 0$; мы можем также опустить индекс, переименовав $k_0 \to k$ (асимптотическое волновое число).

Если бы потенциал отсутствовал, то решение с источником слева было бы просто плоской волной e^{ikx} (с произвольной нормировкой). В присутствии потенциала решение будет содержать отражённую волну, а также прошедшую волну с фазовым сдвигом (см. раздел 9.5). Полное решение уравнения (9.116) можно искать, выделив падающую волну

$$\psi(x) = e^{ikx} + \psi_{\rm sc}(x), \tag{9.117}$$

где *рассеянная волна* $\psi_{\rm sc}(x)$ содержит все эффекты, связанные с потенциалом. Так как падающая волна удовлетворяет уравнению свободного движения, для рассеянной части получаем

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\psi_{\rm sc}(x)=V(x)\psi(x) \tag{9.118}$$

с полной функцией $\psi(x)$ в правой части.

Предположим, что мы знаем *функцию Грина* $G(x,x')$ дифференциального оператора в левой части (9.118), т. е. решение

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)G(x,x')=\delta(x-x'). \tag{9.119}$$

Заметим, что функция Грина зависит от энергии $E=\hbar^2k^2/2m$. От дифференциального уравнения (9.118) перейдем к интегральному уравнению

$$\psi_{\rm sc}(x)=\int dx'\,G(x,x')V(x')\psi(x'). \tag{9.120}$$

В некотором смысле это уравнение является более полным, чем дифференциальное уравнение, потому что мы можем включить в интегральное уравнение необходимые граничные условия. Этого можно добиться конкретным выбором функции Грина. В самом деле, (9.119) не определяет $G(x,x')$ однозначно: мы всегда можем добавить любое решение однородного уравнения (без правой части).

Правильный выбор для источника в левой части должен гарантировать, что $\psi_{\rm sc}$ содержит только отражённую волну e^{-ikx} далеко влево от потенциала, $x\ll -a$, и только волну, распространяющуюся вправо, e^{ikx} при $x\gg a$. Эта асимптотика может быть достигнута, если функция Грина имеет те же свойства, поскольку в уравнении (9.120) переменная x' ограничена областью потенциала, в то время как переменная x относится к точке наблюдения в асимптотике. Функция Грина (9.119) удовлетворяет уравнению свободного движения при $x\neq x'$. Поэтому будем искать эту функцию в форме, определяемой требуемой асимптотикой,

$$G(x,x')=\begin{cases} B(x')e^{-ikx}, & x<x',\\ C(x')e^{ikx}, & x>x'.\end{cases} \tag{9.121}$$

Для того чтобы согласовать решения с обеих сторон от сингулярности, проинтегрируем (9.119) в малом интервале $|x-x'|<\eta$ около точки $x=x'$.

Интегрирование даёт

$$\left[\frac{dG}{dx}\right]_{x=x'-\eta}^{x=x'+\eta} + k^2 \int_{x'-\eta}^{x'+\eta} dx\, G(x,x') = 1. \tag{9.122}$$

Функция Грина сама по себе не содержит особенности в точке $x = x'$ (в противном случае её вторая производная была бы ещё более сингулярной и уравнение не могло бы быть удовлетворено). В пределе $\eta \to 0$ область интегрирования сжимается и интеграл G стремится к нулю. Таким образом, условие согласования в области сингулярности даёт *скачок производной* функции Грина (сравните соответствующие условия в (3.63)),

$$\left(\frac{dG}{dx}\right)_+ - \left(\frac{dG}{dx}\right)_- = 1. \tag{9.123}$$

Непрерывность функции Грина и разрыв её производной приводят к системе уравнений для амплитуд B и C в (9.121),

$$Be^{-ikx'} = Ce^{ikx'}, \quad ik(Ce^{ikx'} + Be^{-ikx'}) = 1, \tag{9.124}$$

которая определяет функцию Грина

$$G(x,x') = \frac{1}{2ik}\begin{cases} e^{-ik(x-x')}, & x < x', \\ e^{ik(x-x')}, & x > x'. \end{cases} \tag{9.125}$$

Отражённая волна при $x \to -\infty$ теперь выражается как

$$\psi_r(x) = \frac{1}{2ik}\, e^{-ikx} \int dx' e^{ikx'} V(x')\psi(x'), \tag{9.126}$$

тогда как для прошедшей волны при $x \to \infty$ мы получаем

$$\psi_t(x) = e^{ikx}\left[1 + \frac{1}{2ik}\int dx' e^{-ikx'} V(x')\psi(x')\right]. \tag{9.127}$$

Таким образом, у нас есть точные выражения для коэффициентов отражения и прохождения:

$$R = \frac{1}{4k^2}\left|\int dx\, e^{ikx} V(x)\psi(x)\right|^2 \equiv \frac{1}{4k^2}|I|^2, \tag{9.128}$$

$$T = \left|1 + \frac{1}{2ik} \int dx\, e^{-ikx} V(x)\psi(x)\right|^2 \equiv \left|1 + \frac{1}{2ik} I^*\right|^2. \tag{9.129}$$

Эти точные выражения по-прежнему содержат неизвестное решение $\psi(x)$. Сохранение вероятности, $R + T = 1$, обеспечивает полезное соотношение между отражательной способностью и мнимой частью интеграла I от волновой функции:

$$R = -\frac{1}{2k} \operatorname{Im} I. \tag{9.130}$$

Это аналог *оптической теоремы*, которая появится в трёхмерной задаче рассеяния.

Задача 9.11

Найти коэффициенты отражения и прохождения для очень узкого потенциала, который моделируется дельта-функцией,

$$U(x) = g\delta(x). \tag{9.131}$$

Решение.

Результаты (9.128) и (9.129) обеспечивают формальные ответы в терминах искомой волновой функции в начале координат, $\psi(0)$:

$$R = \frac{f^2}{4k^2}\, |\psi(0)|^2, \quad T = \left|1 + \frac{1}{2ik}\, f\psi(0)\right|^2, \quad f = \frac{2mg}{\hbar^2}. \tag{9.132}$$

Оптическая теорема (9.130) содержит мнимую часть волновой функции в начале координат,

$$R = -\frac{f}{2k} \operatorname{Im}\Big(\psi(0)\Big). \tag{9.133}$$

Поскольку волновая функция непрерывна в нуле, то можно найти значение $\psi(0)$ с любой стороны. Функция при $x < 0$ даёт

$$\psi(0) = \left[e^{ikx} + \frac{f}{2ik}\psi(0)e^{-ikx}\right]_{x=0} \quad \rightsquigarrow \quad \psi(0) = \frac{2ik}{2ik - f}. \tag{9.134}$$

Окончательно мы находим

$$T = |\psi(0)|^2 = \frac{4k^2}{f^2 + 4k^2}, \quad R = \frac{f^2}{f^2 + 4k^2}. \tag{9.135}$$

При низкой энергии $R \to 1$ в то время как при высокой энергии, $E \gg$ $\gg mg^2/2\hbar^2$, $T \to 1$.

Задача 9.12

Найти прямое решение уравнения Шрёдингера для волновой функции в непрерывном спектре для потенциала (9.131) без использования функции Грина.

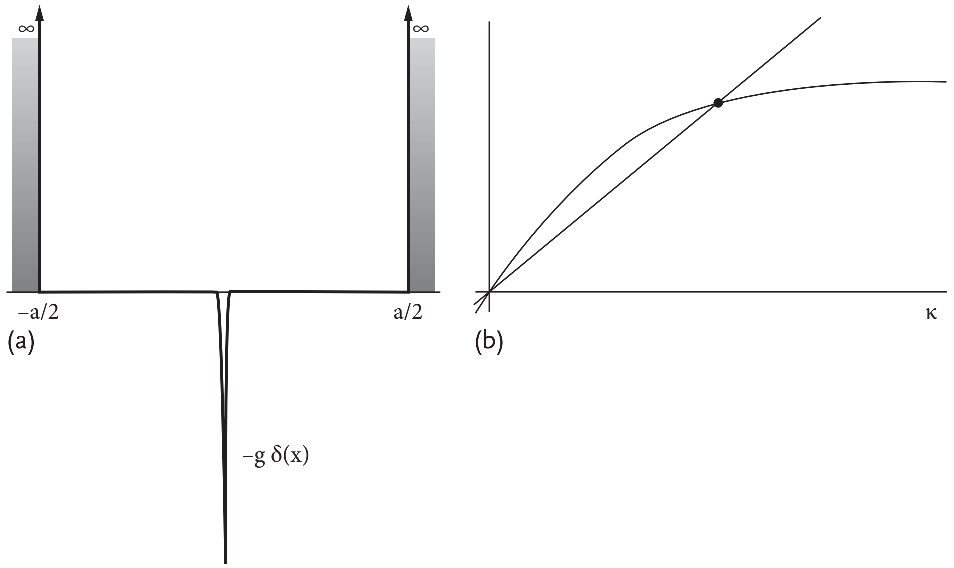

Рис. 9.5: (a) потенциал из задачи 9.13; (b) иллюстрация графического решения

Решение.

Напишите общий вид решения с двух сторон от особенности и получите соответствующие условия, аналогичные уравнению (9.123),

$$\psi_+ = \psi_-, \quad \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_+ - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_- = f\psi(0). \tag{9.136}$$

Задача 9.13

В середине потенциального ящика шириной a имеется дополнительный узкий потенциал притяжения, который может быть смоделирован как $g\delta(x)$, $g < 0$ (рис. 9.5a). Для частицы с массой m найдите условие существования состояния с отрицательной энергией.

Решение.

Без ящика δ-потенциал притяжения имеет одно и только одно связанное состояние (см. раздел 3.5). При наличии ящика энергия этого состояния растёт и связанное состояние с $E < 0$ может исчезнуть. Волновая функция связанного состояния в δ-потенциале должна быть чётной и обращаться в нуль на стенках при $x = \pm a/2$. Соответствующее решение непрерывно в

середине

$$\psi(x) = A \begin{cases} \sinh[\kappa(x + a/2)], & x < 0, \\ -\sinh[\kappa(x - a/2)], & x > 0, \end{cases} \tag{9.137}$$

где

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}, \quad \varepsilon = -E > 0. \tag{9.138}$$

Производная терпит разрыв в δ-потенциале как в (9.136),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(+0) - \psi'(-0)] + g\psi(0) = 0, \tag{9.139}$$

что даёт

$$\tanh\frac{\kappa a}{2} = \frac{\hbar^2\kappa}{m|g|}, \quad g = -|g|. \tag{9.140}$$

Решение существует, если прямая в правой части уравнения, как функция κ, пересекает кривую $\tanh(\kappa a/2)$, т. е. угол наклона прямой в начале координат должен быть меньше, чем $\kappa a/2$ (рис. 9.5*b*),

$$\frac{\hbar^2}{m|g|} < \frac{a}{2} \quad \rightsquigarrow \quad |g| > \frac{2\hbar^2}{ma}. \tag{9.141}$$

Сила δ-потенциала должна быть достаточно большой; в отсутствие ящика, $a \to \infty$, выполняется уравнение (9.141) и связанное состояние всегда существует в согласии с разделом 3.5.

9.11 Потенциал как возмущение

Формальное решение (9.120) с функцией Грина (9.125), куда включены подходящие граничные условия, открывает путь для практических приближений. Если потенциал слаб, мы ожидаем малую вероятность отражения и почти полное прохождение. В этом случае волновая функция должна быть близка к волновой функции падающей волны, будучи лишь слегка искажённой наличием потенциала.

Решение уравнения Шрёдингера может быть проведено на один шаг дальше по сравнению с (9.120), если использовать для *итерации* под знаком

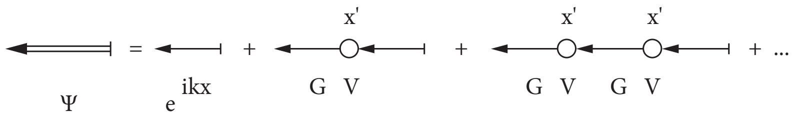

Рис. 9.6: Борновский ряд как последовательность взаимодействий (V) и свободного распространения (G)

интеграла то же выражение для волновой функции:

$$\begin{aligned}\psi(x) =& e^{ikx} + \int dx'\, G(x,x')V(x')\times \\ &\times\left[e^{ikx'} + \int dx''\, G(x',x'')V(x'')\psi(x'')\right].\end{aligned} \tag{9.142}$$

Эта процедура может быть продолжена, что ведёт к бесконечному *борновскому ряду*

$$\psi(x) = e^{ikx} + \sum_{n=1}^{\infty} \psi^{(n)}(x), \tag{9.143}$$

$$\psi^{(n)}(x) = \int dx_1...dx_n\, G(x,x_1)V(x_1)G(x_1,x_2)V(x_2)...V(x_n)e^{ikx_n}. \tag{9.144}$$

Структура этого ряда представлена на рис. 9.6 при очевидном значении графических символов.

Функция (9.144) n-го приближения соответствует плоской волне, распространяющейся справа налево в точку x_n, взаимодействию с потенциалом $V(x_n)$ в этой точке, свободному распространению (это описывается функцией Грина $G(x_{n-1}, x_n)$) до точки x_{n-1}, затем снова взаимодействию $V(x_{n-1})$, свободному распространению до x_{n-2} и т. д. После n взаимодействий линия заканчивается в точке наблюдения x. Таким образом, вся волновая функция представлена в виде суммы по различным путям с *многоступенчатыми* взаимодействиями. В наблюдаемых величинах, таких как коэффициент отражения, все эти пути интерферируют. Интегрирования по x соответствуют интерференции процессов с актами взаимодействия, происходящими в различных местах с потенциалом различной интенсивности. При достаточно общих условиях этот ряд сходится [48].

На практике мы используем этот подход, когда потенциал рассматривается как слабое возмущение. Ряд является разложением по степеням потенциала, и мы ожидаем, что младшие члены ряда дают хорошее при-

ближение к точному результату. Ограничиваясь *однократным* рассеянием, мы приходим к *первому Борновскому приближению*

$$\psi(x) \approx e^{ikx} + \int dx'\, G(x,x')V(x')e^{ikx'}. \tag{9.145}$$

Уравнение (9.128) определяет коэффициент отражения

$$R = \frac{1}{4k^2}\left|\int dx\, e^{2ikx}V(x)\right|^2. \tag{9.146}$$

Вероятность отражения определяется фурье-компонентой потенциала,

$$V_q = \int dx\, V(x)e^{-iqx}, \quad q = -2k, \tag{9.147}$$

для волнового вектора $q = -2k$. Внешний потенциал сообщает импульс $-2\hbar k$ падающей волне, чтобы изменить её движения и преобразовать в упруго отражённую волну. В *многоступенчатых процессах* требуемая передача импульса получается за счёт эффекта многих взаимодействий.

Мы не можем использовать уравнение (9.129), чтобы в том же приближении найти коэффициент прохождения T; это даст недопустимый результат $T > 1$. Такая попытка неправильна, потому что мы уже избавились от всех членов выше первого порядка (и нарушили оптическую теорему). Поэтому мы не можем взять члены второго порядка в уравнении (9.129). Тем не менее мы можем использовать $T = 1 - R$ с R, найденным в (9.146). Следующие члены в волновой функции должны иметь второй порядок и дать поправку к R третьего порядка (интерференция с первым порядком), не меняя членов второго порядка в T.

Коэффициент отражения мал, $R \ll 1$, как предполагается в борновском приближении, если $|V_{2k}|^2 \ll 4k^2$. Потенциал имеет ограниченный радиус действия a и поэтому не малы компоненты Фурье V_q для $q \sim 1/a$, как это следует из соотношения неопределённости. Низкоэнергетическое рассеяние имеет место, если длина волны частицы больше, чем область действия потенциала $ka \ll 1$. В этом случае все компоненты Фурье V_{2k} того же порядка, что

$$V_0 = \int dx\, V(x) \approx \frac{2m}{\hbar^2}\,\bar{U}a, \tag{9.148}$$

где $\bar{U}$ — характерное значение потенциала в области его действия. Тогда условие $R \ll 1$ можно записать в виде

$$\frac{\bar{U}^2 a^2 m^2}{\hbar^2 k^2} \sim \frac{\bar{U}}{\hbar^2/ma^2} \frac{\bar{U}}{\hbar^2 k^2/m} \sim \frac{\bar{U}}{\bar{K}} \frac{\bar{U}}{E} \ll 1. \tag{9.149}$$

Первый фактор – это отношение потенциальной энергии к кинетической, $\bar{K}$, что, в соответствии с соотношением неопределённости (5.45), необходимо для локализации частиц в области взаимодействия, а второй коэффициент представляет собой отношение потенциальной и фактической кинетической энергии E. Таким образом, для успешного применения борновского приближения хорошо иметь слабый потенциал, по сравнению как с $\bar{K}$, так и с E. В случае *высокой энергии* длина волны мала, $qa \gg 1$, и соответствующие высокие фурье-компоненты малы, что облегчает применение борновского приближения.

Задача 9.14

Рассмотреть потенциальный барьер (рис. 2.4) и сравнить точное решение с решением в борновском приближении.

9.12 Квазистационарные состояния

Квазистационарные состояний были рассмотрены в разделе 5.8 в связи с ширинами уровней и конечным временем жизни. Волновая функция такого состояния имеет временную зависимость (5.74),

$$\Psi(t) = \psi e^{-(i/\hbar)(E - i\Gamma/2)t}, \tag{9.150}$$

т. е. формально аналогична временно́й зависимости стационарного состояния с *комплексной энергией*

$$\mathcal{E} = E - i\,\frac{\Gamma}{2}. \tag{9.151}$$

Как мы знаем, эрмитовы операторы могут иметь только вещественные собственные значения. Гамильтониан частицы (9.4) эрмитов на классе нормируемых волновых функций, и мы можем иметь только решения уравнения Шрёдингера с вещественной энергией. В наших задачах рассеяния волновая функция была не нормируемой и рассматривалась в пределе бесконечного объёма. Однако величина энергии определяется удалённым

источником, который создаёт стационарный поток частиц с вещественной $E > 0$.

Рассмотрим теперь условия, при которых уравнение Шрёдингера может иметь решения типа (9.150). Классический пример даётся *радиоактивным распадом* (*Г. Гамов (1928)*). Конечно, реальная проблема является трёхмерной, хотя качественно она может быть рассмотрена (см. задача 2.6) как одномерное радиальное движение, $0 < r < \infty$, ограниченное бесконечно высокой потенциальной стенкой при $r = 0$ (рис. 2.8). Это рассмотрение соответствует, по существу, трёхмерному случаю с орбитальным моментом $\ell = 0$. Соответствующее граничное условие для регулярного решения есть $\psi(r = 0) = 0$.

Область положительных энергий принадлежит непрерывному спектру. «Нормальная» стационарная постановка задачи соответствует рассеянию на потенциале $U(r)$ частиц с вещественной энергией $E > 0$, испускаемых источником при $r \to \infty$ и движущихся влево. Частицы (с энергией даже меньшей, чем высота барьера, $E < U_m$) проникают во внутреннюю область и образуют отражённую назад волну после проникновения. В асимптотической области $[r \to \infty,\ E \gg U(r)]$ волновая функция стационарного состояния является суперпозицией двух волн: падающей волны, идущей справа, и волны, отражённой от центра,

$$\psi(r) \propto e^{-ikr} - S(k)e^{ikr}, \tag{9.152}$$

с волновым вектором $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ и амплитудой рассеянной волны $S(k)$, аналогом S-матрицы в задаче 9.4. Из-за сохранения тока коэффициент отражения равен

$$R(k) = |S(k)|^2 = 1. \tag{9.153}$$

Это означает, что $S(k)$ можно записать в виде

$$S(k) = e^{2i\delta(k)}, \tag{9.154}$$

где $\delta(k)$ — фаза рассеяния (см. раздел 9.5), обусловленная наличием потенциала $U(r)$; $\delta(k)$ — это фаза, накопленная на пути к центру, а 2δ – полная фаза. Знак минус в уравнении (9.152) выбран таким образом, что для свободного движения, $U \equiv 0$, не должно быть никакого сдвига фазы, $S(k) = 1$, и тогда

$$\psi(r) \to \psi_0(r) \propto e^{-ikr} - e^{ikr} \propto \sin(kr), \tag{9.155}$$

что удовлетворяет граничному условию $\psi(0) = 0$ в особой точке начала координат. При наличии потенциала (но за его пределами)

$$\psi(r) \propto e^{-ikr} - e^{2i\delta}e^{ikr} \propto \sin(kr + \delta). \tag{9.156}$$

В асимптотической области мы видим только свободное движение волнового пакета, так что фазовый сдвиг, который определяет его время задержки (9.58), полностью характеризует результаты рассеяния.

Эта формулировка не описывает радиоактивный распад, когда нет никакого удалённого источника продуктов распада, например, альфа-частиц на бесконечности. Альфа-частица (ядро ^{4}He) образована из пары нейтронов и пары протонов внутри ядра из-за сильного притяжения в системе. При общей положительной энергии есть ненулевая вероятность (2.63) для альфа-частицы туннелировать наружу через классически запрещённую область под кулоновским барьером. На больших расстояниях от центра есть только *расходящаяся волна*

$$\psi(r) \propto e^{ikr}. \tag{9.157}$$

В этом случае задача приобретает особенности, подобные задаче о связанных состояниях с отрицательной энергией, которая будет рассмотрена в главе 11. Как мы знаем, для $E = -\varepsilon < 0$ волновая функция должна экспоненциально спадать при $r \to \infty$,

$$\psi(r) \propto e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}. \tag{9.158}$$

Такое решение возможно только при определенных значениях энергии связи ε, и спектр связанных состояний является дискретным. Таким же образом граничное условие (9.157) может быть выполнено только при определённых значениях энергии $E = \hbar^2k^2/2m$. В отличие от подлинных связанных состояний здесь граничное условие является *комплексным* и допустимые значения энергии будут также комплексными, как в уравнении (9.151). Эти затухающие состояния иногда называются *гамовскими*. Если бы потенциальный барьер (см. рис. 2.8) имел протяжённость до $r \to \infty$, состояние с энергией E было бы нормальным связанным состоянием. Конечность барьера приводит к возможности туннелирования, конечному времени жизни $\tau \sim \hbar/\Gamma$ и смещению энергии к нижней части комплексной плоскости (уравнение (9.151)).

Понятие квазистационарного состояния полезно, только если его время жизни достаточно велико, по крайней мере, несколько периодов $\hbar/E$. Тогда ширина мала по сравнению с вещественной энергией, $\Gamma \ll E$, а собственное значение $\mathcal{E}$ близко к вещественной оси энергии. Волновой вектор k также содержит мнимую часть,

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{i}{2}\Gamma\right)}. \tag{9.159}$$

Для малых ширин мы находим

$$k \approx \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\left(1 - i\frac{\Gamma}{4E}\right) = k_0 - \frac{i}{4}\frac{\Gamma}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{9.160}$$

На больших расстояниях волновая функция (9.157) теперь также содержит, помимо уходящей осциллирующей волны, *растущую* экспоненту,

$$\psi \propto e^{[ik_0 + (\Gamma/4\hbar)\sqrt{2m/E}]r} = e^{[ik_0 + (\Gamma/2\hbar v_0)]r}, \tag{9.161}$$

где

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}} \; - \tag{9.162}$$

скорость частицы в свободном движении за барьером. Мы видим, что полная волновая функция (9.150) имеет асимптотику

$$\Psi(r,t) \propto e^{i[k_0 r - (Et)/\hbar]}\, e^{(\Gamma/2\hbar)[(r/v_0) - t]}. \tag{9.163}$$

Отсюда видно, что рост волновой функции для квазистационарного состояния при $r \to \infty$ является результатом накопления вероятности нахождения распадных частиц на больших расстояниях; все частицы, проникшие через барьер, уходят на бесконечность. Амплитуда вероятности одинакова для всех точек (r,t), связанных классическим уравнением движения

$$\frac{r}{v_0} - t = \text{const} = t_0. \tag{9.164}$$

Дополнительная литература: [26, 47, 49].

Ни одна из задач физики не имеет точного решения.

А. Б. Мигдал, В. П. Крайнов, *«Приближённые методы квантовой механики»*

Глава 10

Вариационный подход и диагонализация

10.1 Вариационный принцип

Стационарное уравнение Шрёдингера (9.2) для дискретного спектра связано с определённой *вариационной задачей* минимизации функционала. Пусть ψ — некоторая квадратично-интегрируемая функция, нормированная произвольным образом. Рассмотрим среднее значение энергии в этом состоянии,

$$\langle E\rangle = \frac{\Omega}{I}, \quad \Omega = \int d\tau\, \psi^* \hat{H}\psi, \quad I = \int d\tau\, \psi^*\psi, \tag{10.1}$$

как функционал от ψ. Будем искать функцию ψ, которая даёт экстремум этого функционала. В непосредственной близости от экстремума первая вариация функционала,

$$\delta\langle E\rangle = \frac{\delta\Omega}{I} - \frac{\Omega}{I^2}\,\delta I = \frac{1}{I}\Big(\delta\Omega - \langle E\rangle\delta I\Big), \tag{10.2}$$

обращается в ноль. Будем варьировать функции ψ и ψ^* под интегралами и используем эрмитовость гамильтониана, чтобы получить вариацию энергии в виде

$$\delta\langle E\rangle = \frac{1}{I}\int d\tau\, \Big\{(\delta\psi^*)[\hat{H}\psi - \langle E\rangle\psi] + [(\hat{H}\psi)^* - \langle E\rangle\psi^*]\delta\psi\Big\}. \tag{10.3}$$

Из уравнения (10.3) следует, что условие экстремума $\delta\langle E\rangle = 0$ приводит к функции ψ, которая удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = \langle E\rangle\psi, \tag{10.4}$$

и тогда среднее значение $\langle E\rangle$ в этом состоянии является собственным значением гамильтониана. И наоборот, можно показать, что, если функция ψ обеспечивает экстремум $\langle E\rangle$, она подчиняется уравнению Шрёдингера. Это означает, что минимально возможное собственное значение гамильтониана даёт *абсолютный минимум* функционала $\langle E\rangle$, что таким образом соответствует волновой функции ψ_0 *основного состояния* системы.

Задача 10.1

Показать, что следующее за наименьшим $E_{\min}$ собственное значение $\hat{H}$ даёт минимум $\langle E\rangle$ на классе функций, *ортогональных* ψ_0. (Предполагается, что основное состояние не вырождено.)

Решение.

Условный экстремум может быть найден как абсолютный экстремум функционала энергии с дополнительным членом, содержащим *множитель Лагранжа*; в этом случае нужно искать экстремум нового функционала

$$E_1(\lambda) = \langle E\rangle - \lambda\langle\psi_0|\psi\rangle. \tag{10.5}$$

Значение множителя Лагранжа λ должно быть найдено из условия ортогональности функции $\psi_1(\lambda)$, минимизирующей функционал (10.5) к ранее найденной функции основного состояния ψ_0,

$$\langle\psi_0|\psi_1(\lambda)\rangle = 0. \tag{10.6}$$

Процесс можно продолжать таким же образом для более высоких состояний, налагая дополнительные требования ортогональности с помощью новых множителей Лагранжа.

Задача 10.2

Рассмотрим систему в постоянном внешнем поле f, действующем на переменную $\hat{F}$ системы так, что соответствующий член, добавленный к гамильтониану, равен

$$\hat{h} = f\hat{F}. \tag{10.7}$$

Покажите, что среднее значение $\langle\hat{F}\rangle$, найденное для волновой функции основного состояния $|\psi_0\rangle$ (которое предполагается невырожденным) в присутствии поля, однозначно определяет это поле f [50].

Решение.

Пусть основное состояние $|\psi_0^{(1)}\rangle$ соответствует приложенному полю f_1 и

$$\langle\hat{h}_1\rangle = f_1\langle\psi_0^{(1)}|\hat{F}|\psi_0^{(1)}\rangle \tag{10.8}$$

является средним значением оператора (10.7) в этом состоянии. Если $\hat{H}$ — гамильтониан системы без поля f, энергия основного состояния даётся

$$E_0^{(1)} = f_1\langle\psi_0^{(1)}|\hat{F}|\psi_0^{(1)}\rangle + \langle\psi_0^{(1)}|\hat{H}|\psi_0^{(1)}\rangle. \tag{10.9}$$

Изменяя поле, $f_1 \to f_2$, мы получим другое основное состояние $|\psi_0^{(2)}\rangle$ и энергию

$$E_0^{(2)} = f_2\langle\psi_0^{(2)}|\hat{F}|\psi_0^{(2)}\rangle + \langle\psi_0^{(2)}|\hat{H}|\psi_0^{(2)}\rangle. \tag{10.10}$$

Предположим, что f_2 приводит к *тому же* значению $\langle\hat{F}\rangle$. Согласно вариационному принципу энергия $E_0^{(1)}$, как собственное значение основного состояния $\hat{h}_1 + \hat{H}$, *ниже*, чем среднее значение этого оператора для любого другого линейно независимого состояния, в частности $|\psi_0^{(2)}\rangle$:

$$E_0^{(1)} < \langle\psi_0^{(2)}|\hat{h}_1 + \hat{H}|\psi_0^{(2)}\rangle = f_1\langle\hat{F}\rangle + \langle\psi_0^{(2)}|\hat{H}|\psi_0^{(2)}\rangle. \tag{10.11}$$

Это можно записать эквивалентным образом как

$$E_0^{(1)} < E_0^{(2)} + (f_1 - f_2)\langle\hat{F}\rangle. \tag{10.12}$$

Но состояние $|\psi_0^{(2)}\rangle$ аналогичным образом обеспечивает минимум энергии для поля f_2. Действуя таким же образом, получаем

$$E_0^{(2)} < E_0^{(1)} + (f_2 - f_1)\langle\hat{F}\rangle. \tag{10.13}$$

Уравнения (10.12) и (10.13) несовместимы. Это показывает, что предположение неверно и величина $\langle\hat{F}\rangle$ действительно однозначно определяет приложенное поле f, хотя совсем не обязательно, что любое среднее значение $\hat{F}$ вообще определяет некоторое поле f. Этот простой результат полезен в теории функционала плотности для систем многих частиц (глава 13, том III).

10.2 Прямой вариационный метод

На практике вариационный метод служит удобным способом нахождения *приближённых* решений для основного и низколежащих дискретных состояний уравнения Шрёдингера в реальных ситуациях (сложные атомы, молекулы, атомные ядра, конденсированные среды), когда точные решения не могут быть найдены. Существуют различные способы применения этой идеи. *Прямой вариационный подход* состоит в выборе (на основе физических соображений и правдоподобных предположений) *пробной функции* ψ основного состояния относительно простого вида с несколькими свободными параметрами α_i. Затем вычисляется среднее значение $\langle E\rangle \equiv \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle/\langle\psi|\psi\rangle$ гамильтониана в пробном состоянии и минимизируется зависящий от параметров результат $\partial\langle E\rangle/\partial\alpha_i = 0$. Отсюда определяются значения параметров, которые обеспечивают наилучшее приближение к волновой функции основного состояния в выбранном классе пробных функций.

Если выбор был разумным, результат, как правило, близок к точному. При выборе пробной функции нужно принять во внимание конкретные особенности задачи. Например, результат будет лучше, если пробная функция уже удовлетворяет правильным граничным условиям. Однако это не обязательно для применения прямой вариационной процедуры. Мы должны помнить, что фактическая энергия основного состояния всегда *ниже*, чем та, которую мы нашли с помощью вариационного подхода (они равны, если мы сразу выбрали точное решение).

Задача 10.3

Используя функцию Гаусса

$$\psi(x) \sim e^{-\alpha x^2} \tag{10.14}$$

как пробную волновую функцию, оцените энергию основного состояния для частицы массы m в потенциале линейного гармонического осциллятора (5.55).

Задача 10.4

Для частиц, заключённых в потенциальном ящике между $x = 0$ и $x = a$ (см. раздел 3.1), оцените энергию основного состояния с помощью пробных

функций (взятых только внутри ящика).

$$1.\quad \psi_1(x) = x + \alpha x^2. \tag{10.15}$$

$$2.\quad \psi_2(x) = e^{-|x-\alpha|}. \tag{10.16}$$

$$3.\quad \psi_3(x) = \sin(\alpha x). \tag{10.17}$$

Сравните результаты с точным решением и между собой.

Задача 10.5

В разделе 5.6 мы привели аргумент в пользу того, что любой притягивающий одномерный потенциал с симметричными пределами на $\pm\infty$ содержит, по крайней мере, одно связанное состояние. Доказать это утверждение с помощью вариационного принципа при условии, что потенциал $U(x)$ удовлетворяет неравенству $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, U(x) < 0$.

Решение.

Наиболее подозрительный случай связан с мелкой ямой (задача 3.4), где мы обнаружили, что решение всегда существует в виде (3.50). Это решение является хорошим кандидатом для пробной функции. Удобно (хотя и не необходимо) с самого начала нормировать функцию,

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa}\, e^{-\kappa|x|}. \tag{10.18}$$

Эта функция (обратите внимание, что она чётная) имеет скачок производной в начале координат. Поэтому нужно быть осторожным при расчёте среднего значения кинетической энергии; самый простой способ сделать это — использовать эрмитовость оператора импульса для квадратично-интегрируемых функций и интегрировать по частям (сравните с (9.9)):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x)\nabla^2\psi(x) &= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\nabla\psi(x)|^2 = \\ &= 2\frac{\hbar^2}{2m}\int_{0}^{\infty} dx\, |\nabla\psi(x)|^2 = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}. \end{aligned} \tag{10.19}$$

Отсюда

$$\langle E\rangle = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} + \kappa\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-2\kappa|x|}U(x). \tag{10.20}$$

Эта энергия выше, чем фактическая энергия основного состояния E_0 при любом значении κ. При $\kappa \to 0$ (случай мелкой ямы с большой глубиной

проникновения в классически запрещённую область) потенциальный член (линейный по κ) больше, чем кинетический член, который квадратичен по κ. Поскольку потенциальный член отрицателен для потенциала притяжения, уравнение (10.20) даёт $\langle E\rangle < 0$. Поэтому фактический уровень энергии заведомо является отрицательным и состояние является связанным. Пренебрегая экспонентой под интегралом, мы, по существу, пришли к той же оценке, основанной на соотношении неопределённости, которая была приведена в разделе 5.6; параметр κ соответствует обратной глубине проникновения L в (5.46). Вместо уравнения (5.48) мы получаем методом минимизации по κ улучшенную оценку энергии основного состояния для мелкого потенциала притяжения любой формы.

$$E_0 \approx -\frac{m}{2\hbar^2}\Big(\int dx\, U(x)\Big)^2. \tag{10.21}$$

Можно учесть поправку к этому результату, содержащую $\int dx\,|x|U(x)$.

10.3 Диагонализация в усечённом базисе

Пробная волновая функция также может быть выбрана как лучшее решение с помощью *усечённого базиса* (*вариационный метод Рэлея-Ритца*). Предположим, что некоторый ортонормированный базис $|n\rangle$ качественно близок к фактическому собственному базису гамильтониана, выберем ограниченное подмножество базисных состояний $|n\rangle$ и возьмём комбинацию конечного числа d выбранных состояний,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d} c_n|n\rangle, \tag{10.22}$$

в качестве пробной функции. Выполнив диагонализацию гамильтониана в усеченном пространстве, как это делалось в разделе 6.8 для произвольного эрмитова оператора, сведём задачу к *секулярному уравнению* (6.84),

$$\mathrm{Det}(\hat{H} - E\cdot\hat{1}) = 0. \tag{10.23}$$

Решение его даёт d собственных значений E_i и соответствующие волновые функции, выраженные в виде набора $c_n^{(i)}$ коэффициентов суперпозиции (10.22). Наименьшее собственное значение, найденное этим методом, является лучшим приближением, возможным в классе функций (10.22), к

фактическому значению энергии основного состояния. Если выбор усечённого пространства был физически оправдан, следующие собственные значения могут также быть достаточно хорошими, хотя это и не гарантируется вариационным принципом. Для возбуждённого состояния (состояний) может быть более правильным обрезать полный базис по-другому, а затем ортогонализовывать решения, полученные с разными обрезаниями.

Задача 10.6

Доказать, что при добавлении новых ортогональных базисных векторов к d-мерному множеству первоначального набора мы приходим к значению энергии основного состояния, которое никогда не превышает полученного в предыдущем приближении (чем шире класс пробных функций, тем ближе результат к точному решению). Поэтому энергия основного состояния монотонно уменьшается в процессе расширения вариационного базиса; сравните с разделом 10.7.

Задача 10.7

Вывести секулярное уравнение, используя *неортогональный* базис.

Решение.

С помощью матричных элементов *матрицы перекрытия* $\hat{O}$ для выбранного базиса

$$O_{mn} = \langle m|n\rangle \tag{10.24}$$

получаем секулярное уравнение

$$\mathrm{Det}(\hat{H} - E\hat{O}) = 0. \tag{10.25}$$

10.4 Двухуровневая система

Среди различных ситуаций, которые представляют часто встречающиеся физические условия, особое место занимают системы с двумя состояниями. В *Фейнмановских лекциях* [51] почти всё здание квантовой теории построено на изучении системы с двумя состояниями. Наиболее важным примером, возможно, является система со спином 1/2. Как обсуждалось в разделах 1.9 и 5.11, объект со спином 1/2 имеет при произвольным выборе оси квантования (обозначаемой как z) только два состояния, которые отличаются проекцией спина $s_z = \pm 1/2$. Конечно, эти состояния образуют

только базис, и любая суперпозиция этих двух состояний также возможна. В этом случае система буквально имеет только два состояния. Во многих случаях ограничение двумя состояниями является приближением, которое продиктовано физическими аргументами. Это можно рассматривать как простейшее применение вариационного принципа: мы ищем решение квантовой задачи, используя пробную функцию на усечённом двумерном базисе.

Двухуровневая система должна служить в роли основной ячейки (*кубита*) будущего квантового компьютера, представляя два возможных базисных состояния, 0 и 1, двоичной арифметики. К сожалению, для большинства кандидатов, предложенных для реализации квантового компьютера, двухуровневое приближение не является точным. Существование других состояний может быть вредным для работы компьютера, создавая дополнительный источник разрушения квантовой когерентности в рабочем двумерном пространстве (*декогеренция*).

В приближении двух состояний наиболее общий эрмитов, не зависящий от времени гамильтониан может быть представлен в виде матрицы 2×2,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & V \\ V^* & \varepsilon_2 \end{pmatrix}, \tag{10.26}$$

где мы используем некоторый базис $|1\rangle, |2\rangle$ *невозмущённых состояний.* Следуя традиции, назовём диагональные матричные элементы $\varepsilon_{1,2}$ *невозмущёнными энергиями*, а недиагональные матричные элементы $H_{12} = V$ и $H_{21} = H_{12}^* = V^*$ — *взаимодействием* между невозмущёнными состояниями. В отсутствие взаимодействия невозмущённые состояния являются собственными состояниями гамильтониана с невозмущёнными энергиями. Далее будут полезны обозначения

$$\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1, \quad s = \sqrt{\Delta^2 + 4|V|^2}; \tag{10.27}$$

мы будем считать, что $\Delta \geqslant 0$.

Стационарные волновые функции $|\psi\rangle$ представляют собой суперпозиции базисных невозмущённых состояний (см. уравнение (10.22))

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle, \tag{10.28}$$

где амплитуды $c_{1,2}$ должны быть найдены при условии нормировки

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \tag{10.29}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{10.30}$$

сводится к набору (6.83) алгебраических уравнений для амплитуд $c_{1,2}$,

$$c_1\varepsilon_1 + c_2V = Ec_1, \quad c_1V^* + c_2\varepsilon_2 = Ec_2, \tag{10.31}$$

и нетривиальные решения появляются при энергиях $E_\pm$, которые даются корнями секулярного уравнения (6.84),

$$(E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2) - |V|^2 = 0, \tag{10.32}$$

$$E_\pm = \frac{1}{2}\left[\varepsilon_2 + \varepsilon_1 \pm \sqrt{\Delta^2 + 4|V|^2}\right] \equiv \frac{1}{2}\left(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \pm s\right). \tag{10.33}$$

Чтобы найти стационарные собственные векторы, нужно решить одно из уравнений (10.31) для правильного значения E. Если возмущение является комплексным в исходном базисе, $V = |V|e^{i\alpha}$, может быть удобным исключить фазы, например, с помощью новых амплитуд

$$c_1 = a_1e^{(i/2)\alpha}, \quad c_2 = a_2e^{-(i/2)\alpha}, \tag{10.34}$$

которые удовлетворяют уравнениям

$$(\varepsilon_1 - E)a_1 + |V|a_2 = 0, \quad (\varepsilon_2 - E)a_2 + |V|a_1 = 0 \tag{10.35}$$

и могут быть взяты действительными.

Задача 10.8

Найти амплитуды собственных функций.

Решение.

Решение следует из уравнения (10.35); при выборе $\Delta > 0$ и знака $+$, a_1 и a_2 имеют одинаковые знаки. В случае отрицательного решения их знаки противоположны. Общий знак произволен, решение можно записать в виде

$$a_2^{(+)} = \sqrt{\frac{s+\Delta}{2s}}, \quad a_1^{(+)} = \sqrt{\frac{s-\Delta}{2s}}; \tag{10.36}$$

$$a_2^{(-)} = -\sqrt{\frac{s-\Delta}{2s}}, \quad a_1^{(-)} = \sqrt{\frac{s+\Delta}{2s}}. \tag{10.37}$$

Легко проверить ортонормированность решений.

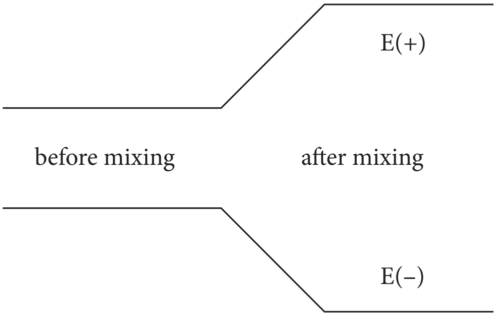

Рис. 10.1: Расталкивание уровней

В невозмущённом пределе, $V \to 0$, верхний уровень $|\psi_+\rangle$ совпадает с $|2\rangle$, а нижний, $|\psi_-\rangle$, — с $|1\rangle$,

$$a_2^{(+)} \to 1, \quad a_1^{(+)} \to 0, \qquad a_2^{(-)} \to 0, \quad a_1^{(-)} \to 1. \tag{10.38}$$

10.5 Расталкивание и непересечение уровней

Как видно из уравнения (10.33), произвольное эрмитово возмущение V приводит к *отталкиванию уровней*, рис. 10.1. Новые энергетические уровни $E_\pm$ имеют интервал s больше, чем у невозмущённых уровней,

$$E_+ - E_- = s = \sqrt{\Delta^2 + 4|V|^2} \geqslant \Delta. \tag{10.39}$$

Расщепление, $s = 2|V|$, появляется даже для вырожденных невозмущённых уровней, $\Delta = 0$.

Обратите внимание, что в случае вырождения все амплитуды собственных состояний имеют абсолютное значение $1/\sqrt{2}$, т. е. независимо от силы смешивания V исходные состояния смешаны одинаково. Например, для вещественного V и $\Delta = 0$ собственные состояния являются *симметричной и антисимметричной* суперпозицией базисных состояний,

$$|\psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|1\rangle \pm |2\rangle\Big). \tag{10.40}$$

Таким образом, вместо пересечения базисных уровней мы получаем их отталкивание и максимальное смешивание; если параметризовать коэффициенты смешивания (10.34) с помощью угла поворота базиса в плоскости, $a_1 = \cos\vartheta$, $a_2 = \sin\vartheta$, максимальное смешивание соответствует $\vartheta = 45°$.

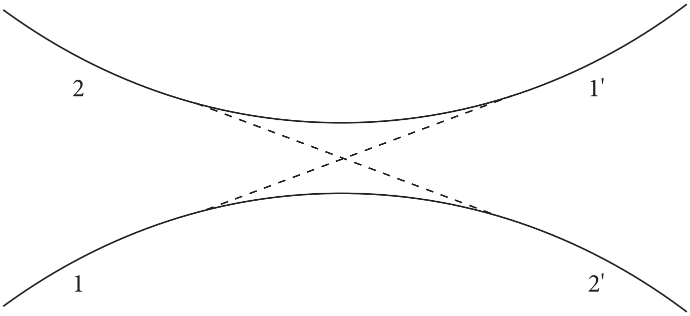

Рис. 10.2: Исчезновение пересечения уровней

Отталкивание уровней — это формально ещё одно проявление вариационного свойства: за счёт увеличения размера пробного пространства от $d = 1$ до $d = 2$ мы сдвигаем нижнее состояние ещё ниже (а верхнее состояние выше), чтобы избежать пересечения. Это формальное свойство приводит к важным физическим следствиям. Рассмотрим сначала случай слабого возмущения V. Чтобы выяснить, что является мерой слабости, сделаем разложение по V/Δ в двухуровневом решении. Меньшая компонента $a_1^{(+)}$ верхнего уровня (уравнение (10.36)) в данном случае не исчезает, но остаётся малой:

$$a_1^{(+)} = \sqrt{\frac{\sqrt{\Delta^2 + 4|V|^2} - \Delta}{2\sqrt{\Delta^2 + 4|V|^2}}} \approx \frac{|V|}{\Delta}, \tag{10.41}$$

где мы пренебрегли поправками второго порядка. Большая амплитуда $a_2^{(+)}$ отличается от единицы только членами второго порядка. Безразмерное отношение недиагональных элементов матрицы (10.26), обеспечивающих смешивание, к интервалу между невозмущёнными уровнями служит показателем слабого смешивания (предел *теории возмущений* будет рассматриваться более подробно позже). Как правило, даже в многоуровневой системе смешивание в основном происходит между невозмущёнными уровнями, близкими по энергии.

Классическая *теорема о непересечении* (*Е. Вигнер, Дж. фон Нейман, 1929*) утверждает, что уровни *одинаковой симметрии* почти всегда избегают пересечения при изменении параметров. Пусть гамильтониан зависит от вещественного параметра λ и, как функция этого параметра, два невозмущённых уровня $\varepsilon_1(\lambda)$ и $\varepsilon_2(\lambda)$ пересекаются при $\lambda = \lambda_c$, так что $\Delta(\lambda_c) = 0$. Если имеется смешивающее взаимодействие V, которое в общем случае

также зависит от λ, пересечения фактических собственных состояний не происходит (рис. 10.2). Вблизи $\lambda = \lambda_c$

$$s(\lambda) \approx \sqrt{(\lambda - \lambda_c)^2 \left(\frac{d\Delta}{d\lambda}\right)^2_{\lambda=\lambda_c} + 4|V(\lambda_c)|^2}. \tag{10.42}$$

Реальное пересечение может происходить только тогда, когда смешивающее взаимодействие исчезает точно в той же точке, $V(\lambda_c) = 0$. Для двух различных функций, $\Delta(\lambda)$ и $V(\lambda)$, вероятность иметь общий ноль мала, хотя случайно это может произойти.

Особый случай имеет место, если система в точке пересечения обладает определенной точной *симметрией*, причём состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ принадлежат различным классам симметрии. Тогда гамильтониан $H(\lambda_c)$ не может смешивать такие состояния и $V(\lambda_c) = 0$. Уровни, зависящие от параметров, обычно называются *энергетическими термами*. Мы приходим к заключению, что термы с различной симметрией могут пересекаться, в то время как внутри одного класса симметрии пересечения не происходят.

Задача 10.9

Пусть в системе со многими состояниями попарные расстояния Δ между ближайшими невозмущенными уровнями и вещественные элементы матрицы смешивания $V \equiv y/2$ являются *случайными величинами* с функциями распределения вероятностей $f(\Delta))$ и $g(y)$. Показать, что, если функции f и g не имеют особенностей при нулевых значениях их аргументов, вероятность $P(s)$ расстояния s между двумя соседними уровнями стремится к нулю *линейно* при малых расстояниях $s \to 0$ (нет пересечения).

Решение.

Распределение по расстоянию между ближайшими уровнями может быть записано, согласно (10.33), в виде

$$P(s) = \int d\Delta\, f(\Delta) \int dy\, g(y)\delta(s - \sqrt{\Delta^2 + y^2}). \tag{10.43}$$

Интегрирование в плоскости (Δ, y) можно переписать в полярных координатах, $\Delta = r\cos\varphi,\ y = r\sin\varphi$,

$$\begin{aligned} P(s) &= \int d\varphi \int r dr\, f(r\cos\varphi) g(r\sin\varphi)\delta(s - r) = \\ &= s \int d\varphi f(s\cos\varphi) g(s\sin\varphi). \end{aligned} \tag{10.44}$$

Если функции f и g не являются сингулярными в начале координат, мы приходим к *линейному отталкиванию*,

$$P(s \to 0) = Cs, \quad C = 2\pi f(0)g(0). \tag{10.45}$$

С геометрической точки зрения мы искали вероятность оказаться точно в начале координат двумерной плоскости, что требует одновременного обращения в нуль двух декартовых координат. В системе с инвариантностью относительно обращения времени матричные элементы V всегда можно взять вещественными (см. раздел 8.1). Если инвариантность относительно обращения времени отсутствует, матричные элементы V, как правило, комплексные, и $V = 0$ означает, что $\operatorname{Re} V = \operatorname{Im} V = 0$. Тогда пересечение уровней требует обращения в нуль трёх независимых параметров одновременно, что является ещё менее вероятным. С учётом аргументов предыдущей *задачи* мы можем заключить, что вероятность наличия малых расстояний s ведёт себя $\propto s^2$. В принципе, статистика спектральных уровней для малых расстояний могла бы, следовательно, дать информацию о наличии сил, нарушающих инвариантность относительно обращения времени.

В сложных системах множественные отклонения от пересечений при сильном смешивании приводят в результате отталкивания уровней к формированию довольно однородной спектральной картины без больших зазоров между соседними уровнями и без слияния уровней. Волновые функции после нескольких пересечений превращаются в очень сложные суперпозиции исходных состояний. Это приводит к характерной картине квантового хаоса (см. главу III.18).

10.6 Эволюция во времени двухуровневой системы

Эволюция во времени системы с двумя состояниями относительно проста, если гамильтониан не зависит от времени. Любое начальное состояние представляет собой суперпозицию стационарных состояний,

$$|\Psi(t = 0)\rangle = b_+|\psi_+\rangle + b_-|\psi_-\rangle. \tag{10.46}$$

Она развивается во времени согласно

$$|\Psi(t)\rangle = b_+(t)|\psi_+\rangle + b_-(t)|\psi_-\rangle, \tag{10.47}$$

где

$$b_{\pm}(t) = b_{\pm} e^{-(i/\hbar)E_{\pm}t}. \tag{10.48}$$

Эволюция также может быть выражена в терминах невозмущённого базиса (10.28),

$$|\Psi(t)\rangle = \left[b_{+}(t)c_1^{(+)} + b_{-}(t)c_1^{(-)}\right]|1\rangle + \left[b_{+}(t)c_2^{(+)} + b_{-}(t)c_2^{(-)}\right]|2\rangle. \tag{10.49}$$

Задача 10.10

Пусть система изначально ($t = 0$) приготовлена в состоянии $|1\rangle$. Найти вероятность $P_2(t)$ нахождения системы в состоянии $|2\rangle$ в момент времени t.

Решение.

Для этих начальных условий,

$$b_{+} = -\,c_2^{(-)}, \quad b_{-} = c_2^{(+)}. \tag{10.50}$$

Тогда искомая вероятность есть

$$P_2(t) = \left|c_2^{(+)}c_2^{(-)}\left(e^{-(i/\hbar)E_{+}t} - e^{-(i/\hbar)E_{-}t}\right)\right|^2 = \frac{4|V|^2}{s^2}\sin^2\left(\frac{st}{2\hbar}\right). \tag{10.51}$$

Вероятность колеблется с *частотой Раби*, равной расстоянию $s/\hbar$ между точными частотами уровней. Максимальная вероятность $4|V|^2/s^2$ достигает 1, если невозмущённые уровни вырождены, $\Delta = 0$. На первом этапе, $st \ll 2\hbar$, населённость верхнего уровня *квадратично* растёт со временем (сравните с (7.119) и далее с разделом III.6),

$$P_2 \approx \frac{|V|^2}{\hbar^2}\, t^2. \tag{10.52}$$

Задача 10.11

Показать, что уравнение (10.49) характеризует унитарность преобразования между невозмущенными и зависящими от времени состояниями.

В вырожденном случае эволюция системы во времени, начиная с невозмущённого состояния $|1\rangle$,

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\Big(e^{-(i/\hbar)E_+t}+e^{-(i/\hbar)E_-t}\Big)|1\rangle+\frac{1}{2}\Big(e^{-(i/\hbar)E_+t}-e^{-(i/\hbar)E_-t}\Big)|2\rangle, \quad (10.53)$$

особенно проста. Переход к базису $|\psi_\pm\rangle \equiv |\pm\rangle$ (для простоты предположим, что фаза $\alpha = 0$)) имеет вид

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle + |-\rangle\Big), \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle - |-\rangle\Big), \quad (10.54)$$

так что временну́ю эволюцию (10.53) можно переписать в виде

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-(i/\hbar)E_+t}|+\rangle + e^{-(i/\hbar)E_-t}|-\rangle\right]. \quad (10.55)$$

Предположим, что верхнее состояние имеет энергию выше, чем порог для некоторого распада, и в действительности является квазистационарным (см. разделы 5.8 и 9.12). Это может быть описано с помощью замены E_+ на комплексную энергию $\mathcal{E} = E_+ - (i/2)\gamma$. После многих времён жизни $t \gg 1/\gamma$ пучок двухуровневых частиц будет состоять только из нижней комбинации $|-\rangle$ с 1/2 начальной интенсивности,

$$|\Psi(t) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-(i/\hbar)E_-t-}|-\rangle = \frac{1}{2}e^{-(i/\hbar)E_-t}\Big(|1\rangle - |2\rangle\Big). \quad (10.56)$$

Теперь если этот пучок претерпевает некоторое взаимодействие с окружающей средой (например, поглощение в среде), которая *различается* для невозмущенных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$, так что компоненты $|1\rangle$ и $|2\rangle$ приобретают амплитуды ξ_1 и ξ_2 соответственно, состояние (10.56) преобразуется согласно

$$\frac{1}{2}\Big(|1\rangle - |2\rangle\Big) \Rightarrow \frac{1}{2}\Big(\xi_1|1\rangle - \xi_2|2\rangle\Big). \quad (10.57)$$

Примечательно, что это означает *регенерацию* нестабильной распавшейся компоненты $|+\rangle$, хотя и с меньшей амплитудой,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[(\xi_1 - \xi_2)|+\rangle + (\xi_1 + \xi_2)|-\rangle\right]. \quad (10.58)$$

Мы вернёмся к двумерным системам в приложениях для спина 1/2, распада каона и нейтринных осцилляций.

10.7 Яркое состояние и фрагментация

Хотя в многомерных задачах точная диагонализация редко может быть достигнута, мы рассмотрим два модельных примера, где точное решение легко получить, а лежащая в их основе физика поучительна и имеет довольно общий характер.

Предположим, что первое приближение для гамильтониана $\hat{H}$ было основано на $N-1$ ортогональных базисных состояний. В результате диагонализации в этом приближении были получены собственные состояния $|k\rangle$, $k=1,\dots,N-1$ гамильтониана $\hat{H}$ и соответствующие собственные значения ε_k. Эти состояния используются как новый базис $\mathcal{B}(N-1)$. В следующем приближении добавляется N-е состояние. Среднее значение $\hat{H}$ в этом состоянии равно $\langle N|\hat{H}|N\rangle = h$; матричные элементы гамильтониана, которые связывают это состояние с предыдущими $(N-1)$ состояниями в базисе $\mathcal{B}(N-1)$, равны V_k, и для простоты V_k будем считать вещественными. Новое состояние может располагаться как на краю старого спектра, так и в середине. Типичная ситуация, когда такая проблема возникает, — это *яркое состояние*: физическая природа состояния $|N\rangle$ может представлять особый интерес. Оно взаимодействует с *фоновыми состояниями* $|k\rangle$, и, как следствие, его интенсивность *фрагментирована*, так как оно разложено по многим точным решениям полного N-мерного гамильтониана.

Матрица $\hat{H}$ в базисе $\{|k\rangle, |N\rangle\}$ выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & \dots & V_1 \\ 0 & \varepsilon_2 & \dots & V_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_1 & V_2 & \dots & h \end{pmatrix}. \tag{10.59}$$

Мы ищем собственные состояния $|\Psi\rangle$ в полном базисе размерности N в виде суперпозиций

$$|\Psi\rangle = \sum_{l=1}^{N} C_l |l\rangle. \tag{10.60}$$

Оператор $\hat{H}$ действует на это состояние согласно

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \sum_{l=1}^{N} C_l \hat{H}|l\rangle = \sum_{l=1}^{N} C_l \left(\sum_{k=1}^{N-1} H_{kl}|k\rangle + H_{Nl}|N\rangle \right). \tag{10.61}$$

Это выражение должно быть равно

$$E|\Psi\rangle = E \left(\sum_{k=1}^{N-1} C_k|k\rangle + C_N|N\rangle \right), \tag{10.62}$$

где E — искомые собственные значения $\hat{H}$ в полном пространстве. Проектируя уравнения (10.60)–(10.62) на отдельные ортогональные состояния, мы приходим к системе N линейных однородных уравнений для амплитуд C_k и собственных значений E,

$$\varepsilon_k C_k + V_k C_N = E C_k, \quad k = 1, \dots, N-1, \tag{10.63}$$

$$h C_N + \sum_{k=1}^{N-1} V_k C_k = E C_N. \tag{10.64}$$

Используя (10.63), выразим все коэффициенты C_k через последний C_N:

$$C_k = \frac{V_k}{E - \varepsilon_k} C_N. \tag{10.65}$$

Подставив этот результат в уравнение (10.64), мы приходим к характеристическому уравнению, являющемуся условием для существования нетривиального решения,

$$E - h = \sum_{k=1}^{N-1} \frac{V_k^2}{E - \varepsilon_k} \equiv F(E). \tag{10.66}$$

Анализ этого уравнения можно легко сделать графически (см. рис. 10.3), где последнее состояние размещено ниже, чем остальные. Правая сторона уравнения (10.66), как функция энергии $F(E)$, имеет $N-1$ полюсов в точках, где находятся невозмущённые собственные значения ε_k. Так как

$$\frac{dF}{dE} = -\sum_k \frac{V_k^2}{(E - \varepsilon_k)^2} < 0, \tag{10.67}$$

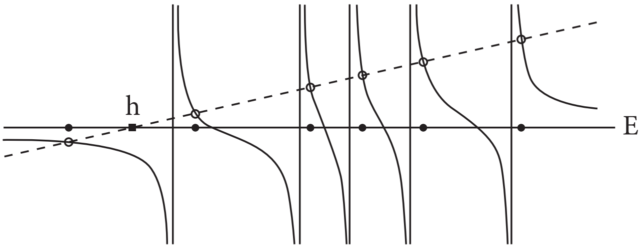

Рис. 10.3: Графический анализ характеристического уравнения (10.66) для N-го состояния, добавленного ниже предыдущего $(N-1)$-мерного спектра

$F(E)$ монотонно уменьшается в каждом интервале, не содержащем полюсов $E=\varepsilon_k$ в точках невозмущённых уровней. Левая часть уравнения (10.66) как функция E представляет собой прямую с наклоном, равным единице, которая пересекает ось абсцисс в точке последнего добавленного состояния $E=h$. Пересечения прямой линии со всеми ветвями $F(E)$ дают ровно N новых собственных значений. Во всех ситуациях наименьшее собственное значение находится *ниже* самого низкого уровня предыдущего приближения, как это должно быть в рамках вариационного подхода. Таким же образом самое высокое собственное значение сдвигается вверх. Другие $N-2$ собственных значений всегда находятся *между* значениями, найденными на предыдущей стадии.

Теперь, пометив собственные состояния $|\Psi^{(\alpha)}\rangle$, новые собственные значения E_α и амплитуды суперпозиции (10.60) C_k^α, мы можем нормировать волновые функции

$$|\Psi^{(\alpha)}\rangle = \sum_{k=1}^{N} C_k^\alpha |k\rangle + C_N^\alpha |N\rangle \tag{10.68}$$

с помощью условия

$$\sum_{k=1}^{N-1} |C_k^\alpha|^2 + |C_N^\alpha|^2 = 1. \tag{10.69}$$

Вместе с (10.65) это определяет

$$|C_N^\alpha|^2 = \frac{1}{1+\sum_{k=1}^{N-1} V_k^2/(E_\alpha-\varepsilon_k)^2}. \tag{10.70}$$

Это выражение также может быть записано с помощью уравнения (10.67) как

$$|C_N^\alpha|^2 = \Big[1 - (dF/dE)_{E_\alpha}\Big]^{-1}, \tag{10.71}$$

где для каждого собственного состояния производная берется при энергии E_α соответствующего решения.

Задача 10.12

Оператор функции Грина оператора

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H}} \tag{10.72}$$

имеет полюсы в точках, соответствующих собственным значениям $E = E_\alpha$. Найти матричные элементы оператора (10.72) и показать, что вычеты в полюсах совпадают с весами (10.71) яркого состояния.

Сила яркого состояния *разбита* на все N стационарных состояний. Для слабой связи собственные значения энергии близки к их невозмущённым значениям и фрагментация слаба $|C_N| \approx 1$ для ближайшего корня и $|C_N| \ll 1$ для других корней. В противоположном пределе очень сильного возмущения, когда суммарная интенсивность связи $I = \sum_k V_k^2$ столь велика, что $\sqrt{I}$ превышает область $\Delta\varepsilon$, покрываемую невозмущённым спектром, низшее и высшее состояния отталкиваются далеко от области $\Delta\varepsilon$ и делят пополам всю силу,

$$(E_{\text{low}} - h)^2 \approx (E_{\text{high}} - h)^2 = I, \quad |C_N(E_{\text{low}}|) \approx |C_N(E_{\text{high}}|) \approx \frac{1}{2}. \tag{10.73}$$

Этим характеризуется переход к *режиму удвоения*, известному в квантовой оптике, ядерной физике и физике конденсированных сред [52].

Задача 10.13

Показать, что полная сила яркого состояния сохраняется,

$$\sum_{\text{all roots } \alpha} |C_N^\alpha|^2 = 1. \tag{10.74}$$

10.8 Коллективные состояния

Здесь мы рассмотрим, казалось бы, противоположную проблему формирования яркого (*коллективного*) состояния, которое аккумулирует силу многих невозмущенных состояний. Пусть N ортогональных состояний $|k\rangle|$ обладают невозмущенными энергиями ε_k, $k = 1, \dots, N$. Они связаны между собой *факторизованными* матричными элементами $\hat{H}$, равными $\beta t_k t_{k'}$, где β является *константой связи* (модель коллективного *гигантского резонанса* или *сверхизлучения*; факторизованное взаимодействие иногда называют *мультиполь-мультипольным*, так как t_k могут быть матричными элементами мультипольных операторов).

Матрица гамильтониана $\hat{H}$ в базисе невозмущённых состояний имеет ненулевые матричные элементы

$$H_{kk'} = \varepsilon_k \delta_{kk'} + \beta t_k t_{k'}. \tag{10.75}$$

Как и при решении предыдущей задачи, мы ищем собственные состояния $\hat{H}$ в виде суперпозиции N базисных состояний,

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{N} C_k |k\rangle, \tag{10.76}$$

где теперь все базисные состояния входят на равных. Как и ранее, мы приходим к уравнению диагонализации в матричной форме

$$\sum_{k'} C_{k'} H_{kk'} = C_k \varepsilon_k + \beta t_k \sum_{k'} C_{k'} t_{k'} = E C_k. \tag{10.77}$$

Мы можем сразу написать формальное решение этого уравнения:

$$C_k = \frac{\beta t_k}{E - \varepsilon_k} A, \quad A = \sum_{k'} t_{k'} C_{k'}. \tag{10.78}$$

Будем считать, что все мультипольные амплитуды t_k не равны нулю. Умножая обе части уравнения (10.78) на t_k и суммируя по k, получаем

$$A \left(1 - \beta \sum_k \frac{t_k^2}{E - \varepsilon_k} \right) = 0. \tag{10.79}$$

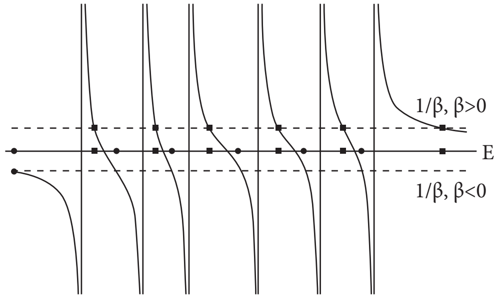

Рис. 10.4: Графическое решение уравнения (10.80)

Если сумма, обозначенная A в уравнении (10.78), обращается в ноль, а $E \neq \varepsilon_k$, то все коэффициенты C_k также исчезают, что приводит к тривиальному (нулевому) решению для собственных функций. Нетривиальные решения определяются характеристическим уравнением для собственных значений E:

$$\frac{1}{\beta} = \sum_k \frac{t_k^2}{E - \varepsilon_k}. \tag{10.80}$$

На рис. 10.4 показано графические решения для положительных и отрицательных значений β. Общая картина аналогична той, что изображена на рис. 10.3. $N-1$ корней находятся между первоначальными энергиями ε_k, в то время как N-е решение сдвинуто от исходного спектра вниз (если $\beta < 0$) или вверх ($\beta > 0$). В вырожденном случае, $\varepsilon_k = \bar{\varepsilon} = \text{const}$, $N-1$ «истинных» корней по-прежнему остаются вырожденными с невозмущёнными значениями $\bar{\varepsilon}$, тогда как сильно сдвинутое *коллективное* состояние имеет собственное значение

$$E_{\text{coll}} = \bar{\varepsilon} + \beta \sum_k t_k^2. \tag{10.81}$$

В сущности, то же значение возникает в невырожденном случае при очень сильной связи, $|\beta| \to \infty$. Как видно из рис. 10.4, в данном случае уровень отталкивается очень далеко и сдвиг может быть больше, чем размер $\Delta\varepsilon$ в исходном спектре. Если это так, мы можем ввести «центр тяжести» $\bar{\varepsilon}$ невозмущенных уровней и положить $\varepsilon_k \approx \bar{\varepsilon} + \xi_k$, где все отклонения ξ_k от центра расположены в пределах $\Delta\varepsilon$. Тогда уравнение (10.80), где мы удерживаем члены до второго порядка по отношению $\Delta\varepsilon$ к большому сдвигу

коллективного уровня, даёт приближённо

$$\frac{1}{\beta} \approx \frac{1}{E-\bar{\varepsilon}} \sum_k t_k^2 \left[1 - \frac{\xi_k}{E-\bar{\varepsilon}} + \frac{\xi_k^2}{(E-\bar{\varepsilon})^2}\right]. \tag{10.82}$$

Теперь мы можем зафиксировать выбор центральной точки $\bar{\varepsilon}$, требуя

$$\sum_k \xi_k t_k^2 = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \bar{\varepsilon} = \frac{\sum_k t_k^2 \varepsilon_k}{\sum_k t_k^2} \tag{10.83}$$

(невозмущённые собственные значения взвешиваются с их силами). При таком выборе решение уравнения (10.82) методом итераций даёт для коллективного собственного значения

$$E - \bar{\varepsilon} \approx \beta \left\{ \sum_k t_k^2 + \frac{\sum_k t_k^2 \xi_k^2}{(E-\bar{\varepsilon})^2} \right\} \approx \beta \sum_k t_k^2 + \frac{\sum_k t_k^2 \xi_k^2}{\beta (\sum_k t_k^2)^2}. \tag{10.84}$$

Если t^2 является типичной (средней) силой невозмущённого состояния, решение (10.84) совпадает с таковым для вырожденного случая (см. уравнение (10.84)), если последний член в (10.84) удовлетворяет

$$\frac{\sum_k t_k^2 \xi_k^2}{\beta^2 (\sum_k t_k^2)^2} \approx \frac{(\Delta\varepsilon)^2}{(\beta N t^2)^2} \ll 1. \tag{10.85}$$

Поправки имеют второй порядок по отношению $\Delta\varepsilon$ к коллективному сдвигу.

Заметим, что коллективные амплитуды C_k^{coll} (см. уравнение (10.78)) для коллективного собственного значения E_{coll} имеют те же знаки, что и соответствующие амплитуды t_k, в то время как для остальных внутренних корней относительные знаки различных амплитуд флуктуируют и зависят от точного положения собственного значения энергии внутри плотного спектра. Это является источником *коллективности* данного специфического состояния: здесь вклады многих внутренних состояний *когерентны*. В пределе сильной связи амплитуды коллективной суперпозиции равны

$$C_k^{\mathrm{coll}} \approx \beta A \frac{t_k}{E_{\mathrm{coll}} - \bar{\varepsilon}} \approx \mathrm{const} \cdot t_k \tag{10.86}$$

или после нормировки

$$C_k^{\mathrm{coll}} \approx \frac{t_k}{[\sum_k t_k^2]^{1/2}}. \tag{10.87}$$

Набор амплитуд t_k можно рассматривать как N-мерный вектор связи $\mathbf{t}$ с компонентами $\{t_k\}$. Вектор амплитуды $\mathbf{C}^{\text{coll}} = \{C_k^{\text{coll}}\}$ в этом пределе есть не что иное, как нормированный вектор связи, т. е. вектор коллективного состояния *выстроен* по вектору связи. Каждая компонента $\mathbf{C}^{\text{coll}}$ мала, порядка $1/\sqrt{N}$, но они когерентны. Можно представить себе, что состояния могут излучать так, что амплитуда излучения исходного состояния $\langle \text{rad}|k\rangle$ пропорциональна t_k. Излучение коллективного состояния определяется коллективной амплитудой

$$\langle \text{rad}|\text{coll}\rangle = \langle \text{rad}\left|\sum_k C_k^{\text{coll}}\right|k\rangle \propto \sum_k C_k^{\text{coll}} t_k \propto N(t/\sqrt{N}) \propto t\sqrt{N}, \quad (10.88)$$

где оценка суммы следует из того, что все элементы в сумме имеют одинаковый знак.

Амплитуда излучения в (10.88) *когерентно усиливается* $\sim \sqrt{N}$, и вероятность излучения увеличивается на фактор $\sim N$ (*сверхизлучение*) [53]. Это явление лежит в основе многих коллективных эффектов в различных квантовых системах, таких, например, как так называемые гигантские резонансы в ядрах или атомных кластерах, где частицы взаимодействуют через *мультиполь-мультипольные* силы. Сверхизлучение, впервые рассмотренное Дикке (см. раздел II.11.9), имеет место в системе N двухуровневых атомов, связанных общим полем излучения (t_k пропорциональны амплитудам излучения) внутри объёма, размер которого меньше, чем длина волны излучения одного атома. Связь через излучение создаёт новые комбинации атомных состояний, в том числе свехризлучательную, которая имеет *ширину* (см. раздел 5.8), в N раз большую, чем радиационная ширина отдельных атомов.

Математическая база этого и подобных эффектов объясняется *факторизованной* структурой матрицы (10.75): в режиме сильной связи (или когда внутренние состояния близки к вырожденным) основная часть матрицы равна $t_k t_{k'}$. Такая матрица имеет ранг 1, т. е. только одно ненулевое собственное значение, равное следу матрицы, $\mathbf{t}^2$. Именно это мы видим в рассматриваемом пределе (уравнение (10.81)).

Выше мы упоминали о предположении, что парциальные амплитуды $t_k \neq 0$. Если некоторые из них, например t_l, исчезают, соответствующее состояние $|l\rangle$ выпадает из процесса коллективизации и собственное значение ε_l не изменится, как видно из исходного уравнения (10.77): это решение имеет только одну ненулевую амплитуду $C_l = 1$ и старое собственное значение $E = \varepsilon_l$.

10.9 Алгоритм Ланцоша

В реальных задачах, особенно в физике многих тел, сложность динамики часто требует очень большого базиса даже для простейшего приближения, чтобы можно было надеяться отразить основные черты реальности. Для примера, даже для нескольких частиц, которые могут быть распределены по нескольким одночастичным орбиталям, комбинаторный рост числа возможных многочастичных конфигураций во много раз увеличивает размерность базиса. Такие масштабные вычисления могут быть выполнены только численно. Здесь мы кратко обсудим один эффективный подход, который имеет независимую ценность.

Пусть $\hat{H}$ — эрмитов гамильтониан сложной системы; для простоты мы считаем все его матричные элементы действительными, так что матрица гамильтониана симметрична, $H_{12} = H_{21}$, в любом ортогональном базисе. Нашей целью является нахождение способа построения нескольких низших состояний наиболее коротким путём. Начнём с произвольного вектора $|\psi_1\rangle$, который на практике должен быть выбран на основе наших физических представлений о структуре основного состояния. Будем предполагать, что это состояние нормировано на единицу. Действуя гамильтонианом $\hat{H}$ на $|\psi_1\rangle$, получим то же состояние и некоторое дополнение, которое мы называем $|\widetilde{\psi}_2\rangle$ и которое полностью принадлежит подпространству, ортогональному $|\psi_1\rangle$:

$$\hat{H}|\psi_1\rangle = \varepsilon_1|\psi_1\rangle + |\widetilde{\psi}_2\rangle, \quad \varepsilon_1 = H_{11}. \tag{10.89}$$

Нормируем новый вектор,

$$|\widetilde{\psi}_2\rangle = V_1|\psi_2\rangle, \quad \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1, \tag{10.90}$$

так что $V_1 = H_{12} = H_{21}$, и

$$\hat{H}|\psi_1\rangle = \varepsilon_1|\psi_1\rangle + V_1|\psi_2\rangle. \tag{10.91}$$

Продолжим процесс, подействовав $\hat{H}$ на вектор $|\psi_2\rangle$. Это приведёт нас обратно к $|\psi_1\rangle$ с той же амплитудой V_1, появится диагональная часть с коэффициентом $H_{22} \equiv \varepsilon_2$, и возникнет часть, ортогональная обоим предыдущим векторам. Предполагая, что третий вектор $|\psi_3\rangle$ нормирован, мы имеем

$$\hat{H}|\psi_2\rangle = V_1|\psi_1\rangle + \varepsilon_2|\psi_2\rangle + V_2|\psi_3\rangle. \tag{10.92}$$

На следующем шаге получим

$$\hat{H}|\psi_3\rangle = V_2|\psi_2\rangle + \varepsilon_3|\psi_3\rangle + V_3|\psi_4\rangle. \tag{10.93}$$

Появление первого вектора здесь невозможно, поскольку тогда мы бы также имели вклад $|\psi_3\rangle$ с той же амплитудой в уравнении (10.91). Вектор $|\psi_4\rangle$ снова ортогонален $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ и $|\psi_3\rangle$.

Таким образом, вместо полной диагонализации повторение одной и той же процедуры приводит гамильтониан к *трёхдиагональному* виду:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & V_1 & 0 & 0 & ... \\ V_1 & \varepsilon_2 & V_2 & 0 & ... \\ 0 & V_2 & \varepsilon_3 & V_3 & ... \\ 0 & 0 & V_3 & \varepsilon_4 & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... \end{pmatrix}. \tag{10.94}$$

Матрицу в таком виде не только намного легче диагонализовать, но и сходимость обычно достигается гораздо быстрее. Одним из практических способов нахождения собственных значений матрицы (10.94) является использование рекуррентного соотношения для детерминантов Δ_n, полученного усечением этой матрицы по n-той строке и столбцу,

$$\Delta_n = \varepsilon_n \Delta_{n-1} - V_n^2 \Delta_{n-2}. \tag{10.95}$$

Оно сразу следует из структуры (10.94).

Задача 10.14 [54]

Рассмотрим бесконечную матрицу типа (10.94), где диагональные элементы расположены в порядке возрастания и существует предел,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{V_n^2}{\varepsilon_n \varepsilon_{n+1}} \equiv \lambda. \tag{10.96}$$

Будем обрезать матрицу при различных растущих размерностях n и извлекать последовательность приближённых значений $E_0^{(n)}$ для наинизшего собственного значения E_0. Согласно вариационному принципу эта последовательность корней детерминантов Δ_n монотонно идёт вниз (мы добавляем возрастающее давление сверху). Используя уравнения (10.95) и (10.96), покажите, что в процессе последовательного усечения энергия сходится к её предельной величине *экспоненциально*, так что при достаточно большом

значении n

$$E_0^{(n)} = E_0 + \text{const} \cdot e^{-\gamma n}, \tag{10.97}$$

где показатель γ равен

$$\gamma = -\ln\left\{\frac{1}{2\lambda^2}\left(1 - 2\lambda^2 - \sqrt{1 - 4\lambda^2}\right)\right\}, \tag{10.98}$$

если предел (10.96) удовлетворяет $\lambda < 1/2$. При $\lambda = 0$ сходимость очень быстрая (факториальная, как можно проверить на примере гармонического осциллятора с линейным возмущением $\propto x$); при $\lambda = 1/2$ сходимость медленнее, как обратная степень λ, а для слишком большого $\lambda > 1/2$ процесс расходится; сравните с аналогичной нестабильностью в уравнении (12.87), также связанной с трёхдиагональной матрицей. Экспоненциальная сходимость может быть очень полезна при численной диагонализации больших матриц гамильтониана, где параметр λ, как правило, мал.

Дополнительная литература: [50, 54, 55].

...проблемы, относящиеся к гармоническому осциллятору, служат прекрасной иллюстрацией общих принципов и формализма квантовой теории.
А. Мессиа, «Квантовая механика»

Глава 11

Дискретный спектр и гармонический осциллятор

11.1 Одномерные связанные состояния

Одномерные связанные состояния имеют нормированные координатные волновые функции, которые стремятся к нулю на бесконечности. Это возможно только если потенциал $U(x)$ ограничивает движение в обоих направлениях. Два условия

$$\psi(x \to \pm\infty) \ \to \ 0 \tag{11.1}$$

могут быть выполнены только для некоторых специальных значений энергии. Эти значения образуют дискретный спектр. Как показали квазиклассические оценки в разделе 3.9, энергетический спектр может иметь любое число связанных уровней, от нуля до бесконечности.

Задача 11.1

Доказать, что в одномерном случае невозможно вырождение связанных уровней.

Решение.

Предположив, что существуют два связанных состояния с одинаковой энергией, нужно применить граничное условие (11.1) к вронскиану (раздел 9.3) и показать, что соответствующие функции пропорциональны друг другу.

Из вида (9.5) уравнения Шрёдингера можно увидеть, что в классически запрещённых областях, $E < U(x)$, кривизна $\psi'' = -k^2(x)\psi$ имеет тот же знак, что и волновая функция. Таким образом, функция не может колебаться под барьером. Она стремится к нулю монотонно (не имеет значения, сверху или снизу, так как общий знак волновой функции произволен). Однако в *классически разрешённых* областях колебания происходят, как

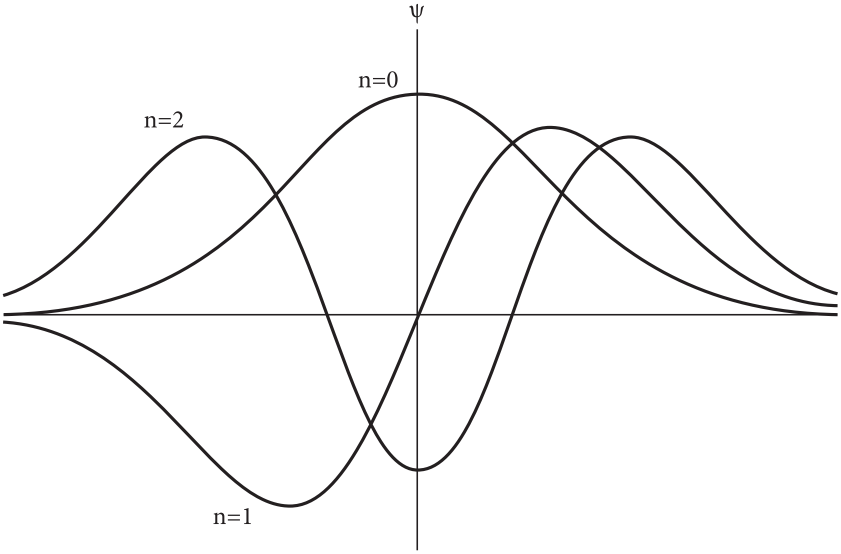

Рис. 11.1: Последовательные волновые функции связанного состояния ψ_n с $n = 0$, 1, и 2

мы знаем из нашего опыта с кусочно-постоянными потенциалами. Такая волновая функция похожа на стоячую волну с некоторым числом колебаний между областями затухания, которое происходит вне классически разрешенных мест.

Дифференциальное уравнение первого порядка (9.27) для вронскиана двух решений справедливо и для дискретного спектра. Это позволяет установить *правила сравнения*, которые помогают упорядочить связанные состояния. Любое связанное решение имеет, по крайней мере, два нуля (на бесконечности, уравнение (11.1)). Если функция не имеет других нулей (*узлов*), мы можем предположить, что она всюду положительна. Любое другое решение должно иметь по крайней мере один нуль (не на бесконечности) для того, чтобы быть ортогональным к первому решению. Справедлива *осцилляционная теорема*, которая утверждает, что волновая функция каждого следующего по энергии связанного состояния имеет ровно один дополнительный узел по сравнению с предыдущим решением с меньшей энергией; узлы n-го решения чередуются с нулями предыдущего $n-1$-го решения (см. рис. 11.1).

Действительно, рассмотрим решения $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ с энергиями E_1 и E_2 соответственно, причём $E_2 > E_1$. Пусть $x = a$ и $x = b$ — два соседних нуля

нижней функции ψ_1 и между ними функция ψ_1, например, положительна,

$$\psi_1(a) = \psi_1(b) = 0, \quad \psi_1 > 0 \quad \text{при} \quad a < x < b. \tag{11.2}$$

В точках a и b определитель Вронского (9.24) для этих решений равен

$$W_{12}(a) = -\psi_1'(a)\psi_2(a), \quad W_{12}(b) = -\psi_1'(b)\psi_2(b). \tag{11.3}$$

Между двумя нулями положительная функция ψ_1 сначала увеличивается, а в конце уменьшается. Таким образом, $\psi_1'(a) > 0$ и $\psi_1'(b) < 0$, так что знак $W_{12}(a)$ является противоположным знаку $\psi_2(a)$, а знак $W_{12}(b)$ такой же, как у $\psi_2(b)$. С другой стороны, уравнение (9.27) с $E_1 < E_2$ показывает, что знак производной dW_{12}/dx между a и b противоположен знаку ψ_2. Если ψ_2 не меняет знака в этой области, будучи, например, положительной, функция W_{12} должна монотонно уменьшаться. Однако согласно предыдущему утверждению знак W_{12} изменяется с отрицательного на положительный, т. е. W_{12} возрастает. Единственное разрешение противоречия состоит в том, что ψ_2 не может иметь одинаковый знак всюду в интервале $[a, b]$. Это означает, что ψ_2 имеет, по крайней мере, один нуль между соседними нулями любых собственных функций с меньшей энергией.

Таким образом, спектр упорядочен так, что волновая функция основного состояния не имеет нулей при конечных значениях x, первое возбужденное состояние ψ_1 имеет один нуль (исключая $\pm\infty$), и ψ_n имеет n конечных нулей (см. рис. 11.1). Из этого результата также следует, что если потенциал $U(x)$ имеет определённую чётность (см. раздел 8.5), волновая функция основного состояния (если оно связано) имеет положительную чётность; нечётная функция обязательно должна иметь дополнительный узел в начале координат. Эти закономерности будут хорошо видны в следующем, практически наиболее важном примере.

11.2 Линейный гармонический осциллятор

Мы уже имели дело с некоторыми аспектами потенциала гармонического осциллятора. Теперь мы в состоянии решить соответствующее уравнение Шрёдингера,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\psi = 0, \quad k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right), \tag{11.4}$$

точно. Конечно, этот потенциал (см. рис. 1.5 ($s = 2$)) имеет только дискретный спектр энергетических уровней. Эта особенность потенциала является нефизической, в реальных ситуациях квадратичный потенциал $\sim x^2$ где-то обрезается, что позволяет системе диссоциировать при достаточно высокой энергии. Однако для низколежащих уровней гармоническое приближение может быть очень хорошим. На самом деле существуют системы, такие как молекулы, которые содержат много связанных состояний, похожих на простые гармонические колебания. Проблема колебаний малой амплитуды вблизи положения равновесия чрезвычайно важна как в классической, так и в квантовой механике. Позже, в главе 14 III тома, мы увидим, что во многих случаях возбужденные состояния системы многих тел могут быть приближённо описаны малыми колебаниями. Кроме того, представление электромагнитного поля в виде набора нормальных колебательных мод (см. главу 14 II том) является краеугольным камнем квантовой электродинамики.

В этом разделе мы детально изучим полное решение дифференциального уравнения (11.4), чтобы продемонстрировать существенные моменты и связанные с ними технические средства. После этого будет представлен алгебраический метод решения, который гораздо проще для приложений и обобщений. В качестве общего рецепта целесообразно начать с решения вблизи особых точек уравнения (см. для сравнения раздел 9.7). Для случая линейного гармонического осциллятора единственная опасность происходит от $|x| \to \infty$. При больших $|x|$, т. е. глубоко под потенциальным барьером, энергетическим членом в уравнении (11.4) можно пренебречь, и мы находим асимптотический вид решения

$$\psi(x) \propto e^{\pm \alpha x^2}, \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}. \tag{11.5}$$

Конечно, только убывающее решение со знаком минус в показателе экспоненты может соответствовать физическому связанному состоянию. Уравнение (11.5) показывает, что типичная глубина проникновения равна $x \sim \sim 1/\sqrt{\alpha} \sim \sqrt{\hbar/m\omega}$. Эта оценка нам уже известна из задачи 5.12а. С помощью этой длины, как естественного масштаба задачи, удобно ввести безразмерную переменную

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \tag{11.6}$$

и использовать ξ как новую координату. Перепишем уравнение Шрёдингера для $\psi(\xi)$:

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon\right)\psi(\xi) = 0, \quad \varepsilon = \frac{E}{(\hbar\omega/2)}, \tag{11.7}$$

где также введена безразмерная энергия ε. В соответствии с (11.5) асимптотическое поведение $\psi(\xi)$ определяется функцией $\exp(-\xi^2/2)$. Полное решение должно содержать эту экспоненту, возможно, умноженную на другую функцию, которая не изменяет убывающий характер асимптотики,

$$\psi(\xi) = v(\xi)\, e^{-\xi^2/2}. \tag{11.8}$$

Используя это подход, вычислим производную по ξ,

$$\psi' = \left(\frac{v'}{v} - \xi\right)\psi,$$

$$\psi'' = \left[\left(\frac{v''}{v} - \frac{v'^2}{v^2} - 1\right) + \left(\frac{v'}{v} - \xi\right)^2\right]\psi = \left(\frac{v''}{v} - 1 - 2\xi\,\frac{v'}{v} + \xi^2\right)\psi, \tag{11.9}$$

и получим

$$v'' - 2\xi v' + (\varepsilon - 1)v = 0. \tag{11.10}$$

Это особая форма *гипергеометрического уравнения*, которое не содержит особенностей и может быть решено при помощи простой полиномиальной функции.

Сразу видно, что полином низшего порядка удовлетворяет этому уравнению: $v = c_0 = \text{const}$ является решением, если $\varepsilon = 1$; $v = c_1\xi$ выполняется при $\varepsilon = 3$. Это низшие чётное и нечётное решения. Так как потенциал симметричен относительно пространственной инверсии, стационарные функции имеют определенную чётность, так что следующим решением после этих двух должен быть чётный полином второго порядка, $v = c_2\xi^2 + \text{const}$, который действительно является решением с $\varepsilon = 5$ и $\text{const} = -c_2/2$. Как и должно быть, более высокие решения добавляют узлы один за другим и имеют чередующиеся чётности. Добившись успеха с низшими полиномами,

будем искать общее решение уравнения (11.10) в виде *степенного ряда*

$$v(\xi) = \sum_n c_n \xi^n. \tag{11.11}$$

Подстановка данного выражения в уравнение (11.10) даёт

$$\sum_n c_n \Big\{ n(n-1)\xi^{n-2} - 2\xi n \xi^{n-1} + (\varepsilon - 1)\xi^n \Big\} = 0. \tag{11.12}$$

Это равенство будет тождественно выполнено, если коэффициенты при каждой степени ξ сокращаются. Собрав все члены $\propto \xi^n$, получаем

$$c_{n+2}(n+1)(n+2) - c_n 2n + (\varepsilon - 1)c_n = 0. \tag{11.13}$$

Таким образом, мы приходим к *бинарному рекуррентному соотношению*

$$c_{n+2} = \frac{2n - (\varepsilon - 1)}{(n+2)(n+1)}\, c_n. \tag{11.14}$$

Взяв любое значение для c_0, мы сможем вычислить все *чётные* коэффициенты c_{2k}; аналогично, начав с некоторого c_1, мы найдём все *нечётные* члены c_{2k+1}. Это автоматически определяет чётные и нечётные решения.

Решение даётся *конечным полиномом*, если в какой-то точке $c_n \neq 0$, то $c_{n+2} = 0$. Тогда все высшие члены ряда равны нулю. Это происходит, если энергетический параметр равен

$$\varepsilon = 2n + 1 \quad \rightsquigarrow \quad E = E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{11.15}$$

что определяет *эквидистантный спектр энергии* для чётных и нечётных n с шагом, равным $\hbar\omega$. Самое низшее решение, $n = 0$, является чётным, когда полином — это просто константа. Поэтому имеем функцию Гаусса, как и в (11.5),

$$\psi_0(\xi) = A_0 e^{-\xi^2/2}. \tag{11.16}$$

Более высокие решения представлены полиномами v_n в порядке увеличения степени; они имеют n конечных узлов в соответствии с осцилляционной теоремой.

Чтобы быть уверенным, что не существует других, неполиномиальных, решений, мы должны понять, что происходит, если ряд (11.11) не пре-

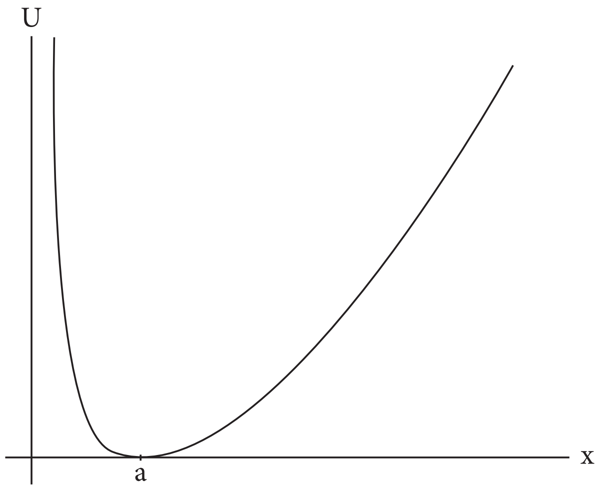

Рис. 11.2: График потенциала для адачи 11.2

кращается на n-м шаге. Тогда у нас есть бесконечный ряд с предельным соотношением $c_{n+2}/c_n \approx 2/n$ между последовательными коэффициентами, как следует из уравнения (11.14). Это то же поведение, как для *возрастающей* экспоненты

$$e^{\xi^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^{2k}}{k!}. \tag{11.17}$$

В самом деле, в этом ряде для $2k = n$ $c_n = 1/(n/2)!$, а для $2k = n + 2$ $c_{n+2} = 1/[(n/2) + 1]!$, что приводит к тому же асимптотическому соотношению $c_{n+2}/c_n = 1/[(n/2) + 1] \approx 2/n$. Таким образом, наш бесконечный ряд асимптотически ведёт себя как $\exp(+\xi^2)$. Этот рост перевешивает убывающую экспоненту в (11.8), так что в результате волновая функция асимптотически *растёт* $\propto \exp(+\xi^2/2)$, и мы приходим к расходящемуся решению, которое уже было отвергнуто в самом начале (см. уравнение (11.8). Таким образом, только *решение в виде конечного полинома* удовлетворяет физическим требованиям к связанному состоянию, и весь дискретный спектр определяется формулой (11.15).

Задача 11.2

а) Найдите энергетический спектр E_n и постройте соответствующие собственные функции $\psi_n(x)$ для частицы с массой m в потенциальном поле,

изображённом на рис. 11.2:

$$U(x) = U_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a} \right)^2, \quad U_0 > 0, \quad a > 0. \tag{11.18}$$

б) Рассмотрите эту же задачу, разложив потенциал вблизи классической точки равновесия, приближённо описав его с помощью параболы и решив задачу для получившегося гармонического осциллятора. Сравните спектр этого приближённого решения с точным.

Решение.

а) Решим стационарное уравнение Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a} \right)^2 \psi = E\psi. \tag{11.19}$$

Потенциал (рис. 11.2) имеет форму ямы с левой стенкой, асимптотически приближающейся к вертикальной оси, и параболической правой стороной. Здесь возможен только дискретный спектр с $E > 0$. Вводя безразмерные положительные переменные

$$y = \frac{x}{a}, \quad q = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}, \quad s = \frac{2mEa^2}{\hbar^2}, \tag{11.20}$$

перепишем уравнение для $\psi(y)$ в виде

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - q\left(y^2 + \frac{1}{y^2} \right)\psi + (2q + s)\psi = 0. \tag{11.21}$$

Теперь посмотрим на поведение вблизи особых точек $y \to +\infty$ и $y \to 0$. При очень больших значениях y уравнение имеет осцилляторный вид:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} \approx qy^2\psi, \quad y \to +\infty. \tag{11.22}$$

Решение здесь ведет себя как

$$\psi \sim e^{\alpha y^2}. \tag{11.23}$$

Тогда находим

$$\psi' = 2\alpha y\psi, \quad \psi'' = (2\alpha + 4\alpha^2y^2)\psi \approx 4\alpha^2y^2\psi, \tag{11.24}$$

и сравнение с (11.22) показывает, что

$$4\alpha^2 = q \quad \rightsquigarrow \quad \alpha = -\frac{1}{2}\sqrt{q}, \tag{11.25}$$

где мы выбираем решение, убывающее на больших расстояниях. Вблизи начала координат берём основные члены в уравнении:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} \approx \frac{q}{y^2}\psi, \quad y \to 0. \tag{11.26}$$

Это уравнение типа *уравнения Эйлер а* с решением в виде степени переменной (оба члена в уравнении понижают степень на 2):

$$\psi \sim y^\gamma, \quad \gamma(\gamma - 1) = q. \tag{11.27}$$

В этом квадратном уравнении нам нужно выбрать положительный корень для γ, чтобы избежать бесконечного роста волновой функции при малых y,

$$\gamma = \frac{1}{2}\left[\sqrt{4q+1} + 1\right]. \tag{11.28}$$

Наконец, введём переменную

$$\xi = \sqrt{q}\, y^2 \tag{11.29}$$

и станем искать полное решение в виде, который учитывает поведение вблизи особенностей,

$$\psi = e^{-\xi/2}\xi^{\gamma/2}u(\xi), \tag{11.30}$$

где $u(\xi)$ должна быть регулярной функцией, которая не изменяет асимптотическое поведение. Подставив это выражение в уравнение (11.21) и убедившись после нескольких алгебраических преобразований, что сингулярности сокращаются, мы приходим к уравнению для $u(\xi)$:

$$\xi u'' + (A - \xi)u' - B\,u = 0, \tag{11.31}$$

где

$$A = \gamma + \frac{1}{2}, \quad B = \frac{\gamma}{2} + \frac{1}{4} - \frac{s + 2q}{4\sqrt{q}}. \tag{11.32}$$

При отсутствии особенностей в уравнении (11.31) мы ищем решение в виде степенного ряда

$$u(\xi) = \sum_k c_k \xi^k. \tag{11.33}$$

Коэффициенты c_k должны удовлетворять бинарному рекуррентному соотношению

$$c_{k+1} = \frac{k+B}{k(k+1+A)}\, c_k. \tag{11.34}$$

Если ряд бесконечен, поведение членов высокого порядка, $c_{k+1} \sim c_k/k$, совпадает с поведением членов ряда, представляющего экспоненту $\exp(\xi)$. Такое поведение было бы сильнее, чем отрицательная экспонента в (11.30) и, следовательно, приводило бы к неприемлемому росту волновой функции. Это означает, что ряд на самом деле должен быть полиномом конечной степени. Полином конечной степени n по $\xi \propto x^2$ возникает, если $c_n \neq 0$, но $c_{k>n} = 0$. Для этого требуется $B = -n$, что является условием квантования энергии, $s = s_n$,

$$\frac{s_n + 2q}{4\sqrt{q}} = n + \frac{\gamma}{2} + \frac{1}{4}, \tag{11.35}$$

или, возвращаясь к исходным обозначениям для s и γ,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\sqrt{1+4q} - \frac{\sqrt{q}}{2} \right). \tag{11.36}$$

Спектром задачи оказывается спектр гармонического осциллятора с частотой

$$\omega = \sqrt{\frac{8U_0}{ma^2}}; \tag{11.37}$$

основное состояние сдвинуто с $(\hbar\omega/2)$ на

$$\Delta E = \hbar\omega \left[\frac{1}{4}\sqrt{1+4q} - \frac{\sqrt{q}}{2} \right]. \tag{11.38}$$

Этот сдвиг всегда положителен, он обращается в нуль только при $q \gg 1$.

Волновые функции могут быть явно построены с использованием последовательных полиномов $u_n(\xi)$. Общее выражение для волновой

функции можно записать в виде

$$\psi_n(x) = N_n x^\gamma e^{-(\sqrt{q}/2a^2)x^2} F\left(-n, \gamma + \frac{1}{2}; \sqrt{q}\frac{x^2}{a^2}\right). \tag{11.39}$$

Здесь N_n — это нормировочный множитель, F является так называемой *вырожденной гипергеометрической функцией*, удовлетворяющей уравнению (11.31) и обычно выражаемой в виде бесконечного ряда:

$$F(B, A; \xi) = 1 + \frac{B}{A}\frac{\xi}{1!} + \frac{B(B+1)}{A(A+1)}\frac{\xi^2}{2!} + \frac{B(B+1)(B+2)}{A(A+1)(A+2)}\frac{\xi^3}{3!} + \ldots. \tag{11.40}$$

Этот ряд становится конечным полиномом при $B = -n$, где $n \geqslant 0$ — целое. Многие известные специальные функции могут быть представлены как частные случаи вырожденной гипергеометрической функции. Например,

функции Бесселя,	$A = 2B$,
функции параболического цилиндра,	$A = \frac{1}{2}$,
неполные гамма-функции,	$B = 1$,
полиномы Лагерра,	$B = -n$,

последний случай — это наше решение.

б) Вблизи классической точки равновесия $x = a$ потенциал близок к потенциалу гармонического осциллятора с эффективной частотой, которая может быть найдена разложением потенциала вблизи этой точки и аппроксимацией кривизны с помощью $m\omega^2/2$:

$$U(x) \approx \frac{1}{2}\frac{d^2U}{dx^2}(x-a)^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2, \quad \omega = \sqrt{\frac{8U_0}{ma^2}}. \tag{11.41}$$

Частота (11.37) в точности совпадает с частотой классического колебания около точки равновесия $x = a$. Однако смещение спектра в целом, которое определяется формулой (11.38), теряется в этом приближении. Данный сдвиг обусловлен формой фактического потенциала, ширина которого у́же, чем у потенциала осциллятора, и все уровни выталкиваются вверх.

11.3 Полиномы Эрмита⋆

Вернёмся к решению (11.8) для гармонического осциллятора. Функции $v_n(\xi)$ (уравнение (11.11)) пропорциональны *полиномам Эрмита* $\mathcal{H}_n(\xi)$,

которые определяются как

$$\mathcal{H}_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \tag{11.42}$$

Как следует из этого определения, данные функции действительно являются полиномами определённой чётности $\Pi_n = (-)^n$. Низшие полиномы Эрмита имеют вид

$$\mathcal{H}_0(\xi) = 1, \quad \mathcal{H}_1(\xi) = 2\xi, \quad \mathcal{H}_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \mathcal{H}_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \tag{11.43}$$

Многие их свойства могут быть получены с помощью *производящей функции* $F(\xi, t)$, коэффициенты разложения которой в ряд Тейлора по степеням t пропорциональны полиномам от ξ. В нашем случае

$$F(\xi, t) = e^{2\xi t - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{H}_n(\xi)}{n!} t^n. \tag{11.44}$$

Выбор является правильным, если

$$\mathcal{H}_n(\xi) = \left(\frac{\partial^n F}{\partial t^n} \right)_{t=0}. \tag{11.45}$$

При написании производящей функции (11.44) в виде

$$F(\xi, t) = e^{\xi^2} e^{-(t-\xi)^2} \tag{11.46}$$

мы видим, что

$$\frac{\partial^n F}{\partial t^n} = e^{\xi^2} (-)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(t-\xi)^2}, \tag{11.47}$$

откуда, действительно, при $t = 0$ получается определение (11.42) полиномов Эрмита.

Задача 11.3

Доказать рекуррентные соотношения

$$\frac{d\mathcal{H}_n(\xi)}{d\xi} = 2n\mathcal{H}_{n-1}(\xi) \tag{11.48}$$

и

$$2\xi\mathcal{H}_n(\xi) = 2n\mathcal{H}_{n-1}(\xi) + \mathcal{H}_{n+1}(\xi). \qquad (11.49)$$

Решение.

Вычислить производные $\partial F/\partial\xi$ и $\partial F/\partial t$ производящей функции $F(\xi, t)$.

Как следует из (11.48) и (11.49), полиномы Эрмита совпадают с $v_n(\xi)$ при условии правильного спектра $\varepsilon = 2n + 1$. Таким образом, собственные функции стационарных состояний линейного гармонического осциллятора равны

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\xi^2/2}\mathcal{H}_n(\xi), \qquad (11.50)$$

где константы A_n могут быть определены из нормировки. Полиномы Эрмита *ортогональны с весом*,

$$I_{nm} \equiv \int d\xi\, e^{-\xi^2}\mathcal{H}_n(\xi)\mathcal{H}_m(\xi) = \sqrt{\pi}\, 2^n n!\delta_{mn}, \qquad (11.51)$$

и это, очевидно, есть условие ортогональности волновых функций (11.50). Для доказательства рассмотрим интеграл I_{nm} при $n \geqslant m$, используя определение (11.42) для $\mathcal{H}_n(\xi)$:

$$I_{nm} = \int d\xi\, e^{-\xi^2}(-)^n e^{\xi^2}\,\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}\,\mathcal{H}_m(\xi) = (-)^n\int d\xi\,\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}\,\mathcal{H}_m(\xi). \qquad (11.52)$$

После n-кратного интегрирования по частям сокращаем $(-)^n$ и переносим производную на многочлен $\mathcal{H}_m$, так как проинтегрированные члены обращаются в нуль на бесконечности,

$$I_{nm} = \int d\xi\, e^{-\xi^2}\frac{d\xi^n\mathcal{H}_m(\xi)}{d\xi^n}. \qquad (11.53)$$

При $n > m$ подынтегральное выражение исчезает, потому что число дифференцирований больше, чем степень полинома $\mathcal{H}_m$. Таким образом, волновые функции с различными энергиями ортогональны, как и должно быть. В случае нормировки, $n = m$, имеем

$$I_{nn} = \int d\xi\, e^{-\xi^2}\frac{d\xi^n\mathcal{H}_n(\xi)}{d\xi^n}, \qquad (11.54)$$

и только старший член полинома $\mathcal{H}_n(\xi)$ (коэффициент при ξ^n) вносит ненулевой вклад. Согласно (11.42) этот коэффициент равен

$$(-)^n e^{\xi^2}(-2\xi)^n e^{-\xi^2} = 2^n \xi^n. \tag{11.55}$$

Отсюда

$$I_{nn} = \int d\xi\, e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}(2^n \xi^n) = 2^n n! \int d\xi\, e^{-\xi^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \tag{11.56}$$

в подтверждение формулы (11.51).

Задача 11.4

Найти значения полиномов Эрмита в начале координат.

Решение.

Из производящей функции получаем

$$\mathcal{H}_{n=\mathrm{odd}}(0) = 0, \quad \mathcal{H}_{n=2k}(0) = (-)^k \frac{(2k)!}{k!}. \tag{11.57}$$

Задача 11.5

а) Доказать интегральное представление полиномов Эрмита:

$$\mathcal{H}_n(\xi) = (-)^n \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} e^{\xi^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-s^2+2i\xi s} s^n. \tag{11.58}$$

б) Вычислить бесконечную сумму, где $|q| < 1$,

$$K(\xi, \eta; q) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{H}_n(\xi)\mathcal{H}_n(\eta)}{2^n n!} q^n. \tag{11.59}$$

Решение.

а) Интеграл в (11.58) получается в результате n-кратного дифференцирования по ξ интеграла для $n = 0$, который является гауссовским. Таким образом, мы приходим к определению (11.42).

б) Используйте представление (11.58) и перемножьте два интеграла. Это даст

$$K(\xi, \eta; q) = \frac{1}{\pi} e^{\xi^2+\eta^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2q)^n}{n!} \int ds\, ds' (ss')^n e^{-s^2-s'^2+2i(s\xi+s'\eta)}. \tag{11.60}$$

При $|q| < 1$ все выражения сходятся, и сначала нужно просуммировать по n, а затем вычислить гауссовы интегралы. В итоге получим

$$K(\xi, \eta; q) = \frac{1}{\sqrt{1-q^2}} e^{[2\xi\eta q - (\xi^2+\eta^2)q^2]/(1-q^2)}. \tag{11.61}$$

Нормированные (по отношению к $\int d\xi$) волновые функции гармонического осциллятора равны

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi^2/2} \mathcal{H}_n(\xi), \tag{11.62}$$

или в исходных переменных

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-m\omega x^2/2\hbar}\, \mathcal{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \tag{11.63}$$

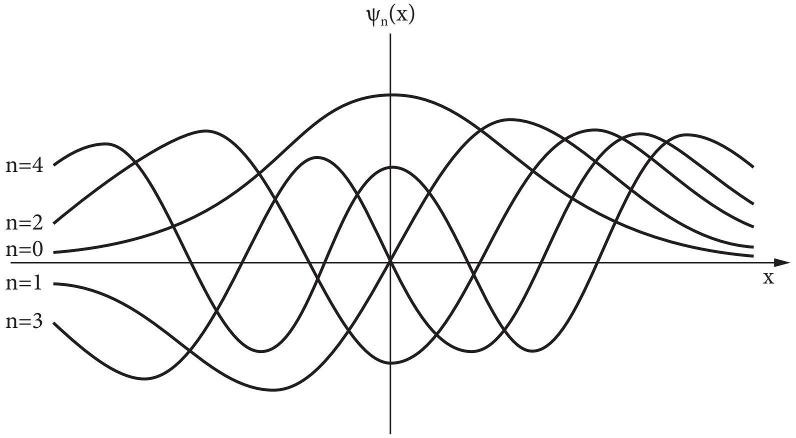

Рис. 11.3: Стационарные волновые функции гармонического осциллятора

со стандартной нормировкой

$$\int dx\,\psi_n(x)\psi_m(x) = \delta_{mn}. \tag{11.64}$$

Несколько типичных волновых функций показаны на рис. 11.3.

Задача 11.6

Рассчитать функцию Грина (пропагатор) (см. уравнение (3.37)) для частицы в потенциале линейного гармонического осциллятора.

Решение.

Используя волновые функции (11.63) и результаты (11.59) и (11.61), получаем

$$\begin{aligned} G(x,t;x',t') = {} & \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin[\omega(t-t')]}}\,\times \\ & \times\exp\left\{\frac{m\omega\Big(2xx' - (x^2+x'^2)\cos[\omega(t-t')]\Big)}{2i\hbar\sin[\omega(t-t')]}\right\}. \end{aligned} \tag{11.65}$$

С помощью уравнения (3.24) легко проверить правильность предела (3.36).

11.4 Гармонический осциллятор в плоскости: разделение переменных

Хотя основная тема этого раздела — одномерное движение, мы можем, пользуясь случаем, показать, как обобщить наше рассмотрение на многомерный гармонический осциллятор. Для двух измерений (x, y) гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m_x} + \frac{1}{2} m_x \omega_x^2 x^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m_y} + \frac{1}{2} m_y \omega_y^2 y^2 \tag{11.66}$$

является просто суммой двух гамильтонианов для независимых линейных осцилляторов,

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y. \tag{11.67}$$

Так как вероятности событий, связанных с независимыми переменными, перемножаются, волновая функция может быть найдена в виде произведения волновых функции для отдельных степеней свободы,

$$\psi(x, y) = X(x) Y(y). \tag{11.68}$$

Такой подход называется *разделением переменных.*

С помощью (11.68) стационарное уравнение Шрёдингера может быть записано как

$$\frac{1}{X} \hat{H}_x X + \frac{1}{Y} \hat{H}_y Y = E. \tag{11.69}$$

Два члена в левой части (11.69) зависят от различных переменных, и их сумма может быть константой, только если каждый из них также является константой. Очевидно, это означает, что полная энергия разделяется на энергии отдельных движений,

$$\hat{H}_x X(x) = E_x X(x), \quad \hat{H}_y Y(y) = E_y Y(y), \quad E_x + E_y = E. \tag{11.70}$$

Заметим, что разделение переменных вносит *новые квантовые числа*, в данном случае — энергии подсистем. Разделение уравнений для колебаний по x и по y даёт такой же спектр, как в (11.15),

$$E_x = \hbar \omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right), \quad E_y = \hbar \omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right), \tag{11.71}$$

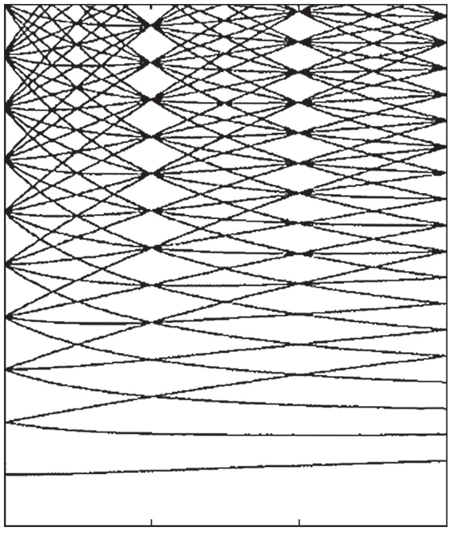

Рис. 11.4: Спектр энергий двумерного гармонического осциллятора как функция параметра деформации $u = \omega_x/\omega_y$

поэтому уровни полной энергии системы помечены двумя целыми квантовыми числами, n_x и n_y,

$$E(n_x, n_y) = E_x(n_x) + E_y(n_y) = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right). \quad (11.72)$$

Соответствующая волновая функция является произведением (11.68) функций осциллятора (11.63),

$$\psi_{n_x n_y}(x, y) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y). \quad (11.73)$$

Это простое упражнение даёт представление о том, как распространить данный подход на любое количество независимых степеней свободы осциллятора.

11.5 Изотропный осциллятор

Для произвольных частот ω_x и ω_y энергетический спектр задаётся, очевидно, случайным набором чисел. Тем не менее если частоты связаны простым соотношением, например, $u = \omega_x/\omega_y = p/q$, где p и q — целые чис-

ла, спектр зависит от одной комбинации квантовых чисел $N = pn_x + qn_y$. Все состояния с одинаковым N являются *вырожденными*, и спектр приобретает *оболочечную структуру* (см. рис. 11.4). Такой *резонанс* может быть хорошо интерпретирован с помощью классических *фигур Лиссажу*, изображающих периодические траектории в плоскости с периодом $T = qT_y = pT_x$.

Интересный случай, в частности, возникает, когда частоты колебаний по различным осям *равны*, $\omega_x = \omega_y \equiv \omega$. В этом случае мы можем ввести общее квантовое число $N = n_x + n_y$, и энергия

$$E = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2} + n_y + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega(N+1) \qquad (11.74)$$

зависит от N, а не от двух независимых квантовых чисел. Поэтому $d = N+1$ уровней с тем же N, но различным распределением между n_x и n_y имеют одну и ту же энергию. Структура оболочек задаётся с помощью

N	$d = N+1$	(n_x, n_y)	(n, m)
0	1	$(0,0)$	$(0,0)$
1	2	$(1,0),(0,1)$	$(0,\pm 1)$
2	3	$(2,0),(1,1),(0,2)$	$(0,\pm 2),(1,0)$
3	4	$(3,0),(2,1),(1,2),(0,3)$	$(0,\pm 3),(1,\pm 1)$

. (11.75)

Здесь вырождение появляется только из-за равенства частот. Массы осцилляторов $m_{x,y}$ и силы упругости могут быть разными, но частоты совпадают, давая простейший резонанс между двумя режимами колебаний. Если частоты не являются абсолютно равными, но все ещё близки, так что их *расстройка* $\Delta\omega \ll \omega_{x,y}$, точного вырождения нет. Тем не менее система по-прежнему имеет спектр из групп близких уровней с бо́льшими промежутками между группами, чем внутри группы. *Квазивырождение*, или близость к резонансу, в том числе более сложные случаи p/q, лежат в основе структуры оболочек в системах многих тел, таких как атомы, ядра, атомные кластеры и искусственные объекты в конденсированных средах, известные как квантовые точки [11, 56]. Будучи квантовым остатком классических периодических орбит [5], оболочки появляются также в физических примерах, отличных от гармонического осциллятора.

Другим проявлением той же симметрии является появление новых интегралов движения. Действительно, подобно рассмотрению квадратичных форм гамильтониана в классической механике [13], мы всегда можем свести кинетическую часть энергии к виду $(1/2)(p_1'^2 + p_2'^2)$ с помощью преобразо-

вания переменных

$$p_a = \sqrt{m_a} p'_a, \quad x_a = \frac{x'_a}{\sqrt{m_a}}. \tag{11.76}$$

Такие *канонические* преобразования сохраняют классические скобки Пуассона (7.94) между координатами и импульсами и, следовательно, оставляют инвариантной всю гамильтонову динамику. Аналогично такое же каноническое преобразование квантовых операторов сохраняет их коммутационные соотношения (7.95) и операторные уравнения движения (7.96) и (7.97). После такого преобразования гамильтониан двух осцилляторов (11.66) с равными частотами становится изотропным в плоскости,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}'^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{\mathbf{r}}'^2, \tag{11.77}$$

где введены двумерные векторы $\mathbf{r}'$ и $\mathbf{p}'$. Гамильтониан (11.77) инвариантен относительно вращений в плоскости xy. Поэтому генератор таких вращений (в новых координатах (11.76)), орбитальный момент вдоль оси z (раздел 4.5), сохраняется,

$$[\hat{\ell}_z, \hat{H}] = 0. \tag{11.78}$$

Сохранение орбитального момента обеспечивает возможность маркировки стационарных состояний, помимо энергии, по квантовому числу m, являющемуся собственным значением оператора $\hat{\ell}_z$ (раздел 7.10). Однако оператор $\hat{\ell}_z$, коммутирующий с полным гамильтонианом, не коммутирует с его частями $\hat{H}_x$ и $\hat{H}_y$, так как вращение вокруг оси z смешивает x- и y-координаты. Классификация стационарных состояний с использованием n_x и n_y является *несовместимой* с определённым значением ℓ_z. Эта ситуация похожа на ту, что была рассмотрена в задаче 6.13 и в примере вектора Рунге-Ленца (раздел 7.10). Это обычная квантовая дилемма: состояния могут быть описаны либо на языке декартовых квантовых чисел, или с использованием орбитального момента, но не одновременно. Мы знаем из задачи 6.13, что в таких случаях стационарные состояния должны быть вырожденными. В результате задача двумерного изотропного осциллятора допускает разделение переменных в двух наборах координат.

11.6 Решение задачи в полярных координатах

Введём полярные координаты (4.64) на плоскости, тогда оператор орбитального момента $\hat{\ell}_z$ даётся производной по углу (4.68). Гамильтониан (11.77), где мы опустим штрихи у переменных, содержит в кинетической части оператор Лапласа для двух измерений, который может быть записан в переменных (ρ, φ) как

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{11.79}$$

Угловая часть пропорциональна $\hat{\ell}_z^2$, так что гамильтониан в полярных координатах принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{\hbar^2 \hat{\ell}_z^2}{2\rho^2} + \frac{1}{2}\omega^2 \rho^2. \tag{11.80}$$

От φ здесь зависит только часть, связанная с орбитальным моментом, которая может быть интерпретирована как *вращательная* или *центробежная* энергия с моментом инерции $I = m\rho^2$.

Новое разделение переменных подсказывает вид решения

$$\psi(\rho, \varphi) = R(\rho)\Phi(\varphi), \tag{11.81}$$

а для угловой функции мы берём собственную функцию (4.72) оператора проекции орбитального момента, соответствующую целому квантовому числу m (не путать с массой, которая была исключена с помощью преобразования (11.77)),

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \ldots. \tag{11.82}$$

Этот набор функций является универсальным и определяется инвариантностью относительно вращений в плоскости. Энергетический спектр должен быть найден из оставшегося радиального уравнения для функции $R_m(\rho)$, которая зависит от m,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{\hbar^2 m^2}{2\rho^2} + \frac{1}{2}\omega^2 \rho^2\right] R_m(\rho) = E R_m(\rho). \tag{11.83}$$

Обратите внимание, что энергия для $m \neq 0$ не может зависеть от знака m, вследствие инвариантности относительно обращения времени, что делает два направления вращения эквивалентными. Для каждого значения $|m|$ движение происходит в *эффективном потенциале*

$$U_m(\rho) = \frac{\hbar^2 m^2}{2\rho^2} + \frac{1}{2}\omega^2\rho^2. \tag{11.84}$$

Минимум этого потенциала смещается от начала координат в точку $\rho_0(m) = (\hbar|m|/\omega)^{1/2}$, а нижняя точка эффективного потенциала даётся выражением

$$(U_m)_{\min} = \hbar\omega|m|. \tag{11.85}$$

Задача 11.7

Решить дифференциальное уравнение (11.83), найти полный набор радиальных собственных функций $R_{nm}(\rho)$ и показать, что энергетический спектр даётся

$$E(n, m) = \hbar\omega(2n + |m| + 1), \tag{11.86}$$

где n является *радиальным квантовым числом*, равным числу узлов $R_m(\rho)$. Член $\hbar\omega|m|$ соответствует новой нижней точке (11.85) эффективного потенциала для данного $|m|$.

Решение.

Уравнение, которое нужно решить, имеет вид (в новых единицах (11.76) масса равна 1)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{\omega^2}{\hbar^2}\rho^2 + k^2\right] R_m = 0, \tag{11.87}$$

где $k^2 = 2E/\hbar^2$. Действуем аналогично тому, как мы искали решение для линейного осциллятора в задаче 11.2. Асимптотическое решение при $\rho \to \infty$ определяется производными и основным потенциалом осциллятора; как и ранее,

$$R_m \propto e^{-\alpha\rho^2}, \quad \alpha = \frac{\omega}{2\hbar}. \tag{11.88}$$

Новым элементом является наличие при $m \neq 0$ ротационной особенности в начале координат, $\rho \to 0$. Эта особенность имеет геометрический характер:

азимутальный угол не определён в начале координат, так что зависимость от φ должна исчезнуть, если функция имеет однозначный смысл в этой точке. Поведение в окрестности начала координат определяется производными, а также центробежным членом; соответствующее уравнение Эйлера имеет решение $\propto \rho^{\gamma}$, которое определяет $\gamma = \pm m$ через проекцию орбитального момента. Для $m = 0$ волновая функция без угловой зависимости стремится к константе вблизи начала координат; для $m \neq 0$ мы должны взять положительную степень, чтобы получить узел радиальной функции, поэтому выбираем

$$R_m \propto \rho^{|m|}, \quad \rho \to 0. \tag{11.89}$$

Теперь аналогично (11.8) явно выделим асимптотическое поведение и будем искать решение в виде

$$R_m(\rho) = v_m(\rho)\, \rho^{|m|} e^{-\alpha\rho^2}. \tag{11.90}$$

После этой подстановки мы получим новое уравнение для $v_m(\rho)$,

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{2|m|+1}{\rho} - 4\alpha\rho\right)\frac{d}{d\rho} + k^2 - 4\alpha\Big(|m|+1\Big)\right] v_m = 0. \tag{11.91}$$

Поскольку уравнение не меняется при формальной замене $\rho \to -\rho$, решение является функцией ρ^2, и удобно ввести новую переменную,

$$\eta = 2\alpha\rho^2, \tag{11.92}$$

что приводит к так называемому *уравнению Куммера*,

$$\eta v_m'' + \Big(|m| + 1 - \eta\Big) v_m' - \frac{1}{2}\left(|m| + 1 - \frac{k^2}{4\alpha}\right) v_m(\eta) = 0, \tag{11.93}$$

где штрихи относятся к производным по η. Условие квантования $B = -n$ определяет энергетический спектр (11.86). Решение снова даётся полиномами Лагерра $v_m(\eta) = F(B, A; \eta)$.

В новых координатах мы успешно разделили переменные и построили собственные состояния с определёнными значениями $\ell_z = m$ и тем же спектром энергии, где, однако, главное квантовое число N теперь представлено как $N = 2n + |m|$. В последнем столбце таблицы (11.75) показано, как волновые функции в декартовых координатах могут быть поставлены в соответствие с правильными вращательными линейными комбинация-

ми. Ясно, что состояния с $m \neq 0$ всегда идут попарно и $|m|$ чётно при чётном N и нечётно для нечётного N. Каждый квант вдоль оси x или y увеличивает степень соответствующего полинома Эрмита и изменяет чётность функции так, что чётность N и $|m|$ такая же, как чётность общего количества декартовых квантов. Чтобы связать два описания, мы должны выразить зависимость от φ через экспоненты $\exp(\pm im\varphi)$. Для вакуумного состояния $n_x = n_y = N = 0$, очевидно, $m = 0$, и это единственная волновая функция, которая является одинаковой в обоих представлениях. Для следующего уровня, $N = 1$, две декартовы функции содержат полиномы, пропорциональные x и y; их правильные комбинации даются сферическими компонентами

$$x \pm iy = \rho(\cos\varphi + i\sin\varphi) = \rho e^{\pm i\varphi}. \tag{11.94}$$

Таким образом, переход между представлениями выполняется согласно

$$|n = 0; m = \pm 1\rangle \propto (x \pm iy)|n = 0, m = 0\rangle \propto$$

$$\propto |n_x = 1, n_y = 0\rangle \pm i|n_x = 0, n_y = 1\rangle. \tag{11.95}$$

Комбинации (11.95) могут быть нормированы путём умножения на $1/\sqrt{2}$. Переходя к $N = 2$ и начиная с

$$(x \pm iy)^2 = \rho^2 e^{2i\varphi} = x^2 - y^2 \pm 2ixy, \tag{11.96}$$

получаем

$$|n = 0, m = \pm 2\rangle \propto (x^2 - y^2 \pm 2ixy)|n = 0, m = 0\rangle. \tag{11.97}$$

Для состояний $|n = 1, m = 0\rangle$ нам нужна инвариантная относительно вращений функция, которая добавляет две степени координат, но не содержит угловой зависимости. Естественного множителя $x^2 + y^2 = \rho^2$ недостаточно, так как функция $\rho^2|n = 0, m = 0\rangle$ не ортогональна к вакуумной функции. Нам нужно сформировать полином второго порядка $\rho^2 + \text{const}$, который обеспечивает ортогональность. Вся эта техника значительно упрощается при использовании операторных методов, что является нашей следующей темой.

11.7 Лестничная конструкция

При работе с дискретным спектром полезно иметь в распоряжении операторы, которые возбуждают систему или снимают её возбуждение, реализуя переходы с одного уровня на другой. Это особенно легко сделать в случае гармонического осциллятора.

Предположим, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \lambda \hat{A} \tag{11.98}$$

с некоторым числом λ. Если это так, мы можем назвать оператор $\hat{A}$ *собственным оператором* B и λ — его собственным значением, хотя оно не является собственным значением в обычном смысле. Рассмотрим действие уравнения (11.98) на собственное состояние $|b\rangle$ оператора $\hat{B}$ с собственным значением b. Используя

$$\hat{B}|b\rangle = b|b\rangle \tag{11.99}$$

и (11.98), получаем

$$\hat{B}\Big(\hat{A}|b\rangle\Big) = \Big([\hat{B}, \hat{A}] + \hat{A}\hat{B}\Big)|b\rangle = (b - \lambda)\Big(\hat{A}|b\rangle\Big). \tag{11.100}$$

Таким образом, действие $\hat{A}$ на собственное состояние $|b\rangle$ создаёт новый вектор $\hat{A}|b\rangle$, который снова является собственным вектором $\hat{B}$, но со сдвинутым собственным значением, $b' = b - \lambda$.

Можно сказать, что собственный оператор $\hat{A}$ перемещает вниз по спектру $\hat{B}$, каждый раз понижая собственное значение $\hat{B}$ на одно и то же число λ (в отличие от обычных собственных значений λ измеряет *расстояние* между уровнями). Из операторного соотношения (11.98) следует, что спектр $\hat{B}$ содержит *эквидистантную лестницу*,

$$\begin{array}{ccc} |b\rangle & \to & b, \\ \hat{A}|b\rangle & \to & b - \lambda, \\ \hat{A}^2|b\rangle & \to & b - 2\lambda, \dots . \end{array} \tag{11.101}$$

Эрмитово сопряжение (11.98) показывает, что таким же образом $\hat{A}^\dagger$ строит растущую лестницу в спектре $\hat{B}^\dagger$ с собственными значениями $b^*, b^* + \lambda^*, \dots$. Если $\hat{B}$ эрмитов, это должна быть та же лестница, так что b и λ являются действительными. Коммутатор двух эрмитовых операторов антиэрмитов

(см. уравнение (6.155)) и начальное условие (11.98) не может быть выполнено, за исключением $\lambda = 0$, когда операторы коммутируют и действие $\hat{A}$ относится к подпространству состояний, вырожденных по отношению к $\hat{B}$ (см. раздел 6.13). Лестничная конструкция может также быть выражена как *правило отбора* для оператора $\hat{A}$: его матричные элементы между двумя собственными состояниями b и b' должны подчиняться

$$\langle b'|[\hat{A}, \hat{B}] - \lambda\hat{A}|b\rangle = 0 = (b - b' - \lambda)\langle b'|\hat{A}|b\rangle. \tag{11.102}$$

Это означает, что матричные элементы $\hat{A}$ в собственном базисе $\hat{B}$ могут отличаться от нуля только между теми состояниями, которые удовлетворяют условию $b' = b - \lambda$.

В качестве простого примера можно вспомнить коммутационные соотношения вектора $\hat{V}$ с орбитальным моментом $\hat{\vec{\ell}}$ (уравнения (4.35)–(4.37)):

$$[\hat{\ell}_i, \hat{V}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{V}_k. \tag{11.103}$$

Переходя к сферическим компонентам векторов, сравните с (11.94),

$$V_\pm \equiv V_x \pm iV_y, \tag{11.104}$$

мы находим соотношения для лестницы

$$[\hat{V}_\mp, \hat{\ell}_z] = \pm\hat{V}_\mp. \tag{11.105}$$

Таким образом, *для любого векторного оператора*, $\hat{V}_-$ понижает проекцию углового момента на единицу, в то время как $\hat{V}_+$ повышает эту проекцию на единицу. Именно поэтому мы смогли построить состояния с $\Delta m = +1$ в предыдущем разделе простым действием повышающего оператора $x + iy \equiv r_+$.

Является ли лестница бесконечной или конечной (в одном или обоих направлениях), зависит от конкретного случая, как мы увидим ниже.

11.8 Операторы рождения и уничтожения

Линейные операторы вместе со своими произведениями и коммутаторами образуют *операторную алгебру*. *Алгебра Гейзенберга-Вейля*, образованная канонически сопряжёнными операторами координаты $\hat{x}$ и импульса $\hat{p}$ (плюс единичный оператор), является наиболее простой из возможных. Здесь

единственным нетривиальным коммутатором, как мы знаем, является

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \tag{11.106}$$

В классической механике мгновенное положение частицы может быть задано точкой в фазовом пространстве (x, p). Удобно ввести безразмерные, взаимно эрмитово сопряжённые операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ таким образом, чтобы их классическое изображение было бы точкой в плоскости комплексной переменной a, чьи реальная и мнимая части были бы пропорциональны x и p соответственно. Масштаб преобразований к новым переменным произволен, мы будем использовать положительный масштабный параметр ν, который имеет размерность $\sqrt{m\omega}$, так что

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\nu\hat{x} + \frac{i}{\nu}\,\hat{p}\right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\nu\hat{x} - \frac{i}{\nu}\,\hat{p}\right). \tag{11.107}$$

Переменные $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ имеют единичный коммутатор

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \tag{11.108}$$

Обратное преобразование имеет вид

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}\,\frac{1}{\nu}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\,\nu(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \tag{11.109}$$

Чтобы построить лестницу, сначала введём оператор $\hat{N}$,

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}, \tag{11.110}$$

который, согласно задаче 6.3в, является эрмитовым и неотрицательным

$$\langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle \geqslant 0 \tag{11.111}$$

для любого состояния $|\psi\rangle$. Это среднее значение может быть нулём только для состояния, уничтоженного оператором $\hat{a}$ (превращённого в нулевой вектор). Такое состояние, если оно существует, будет называться *вакуумом* и обозначаться $|\mathrm{vac}\rangle$,

$$\hat{a}|\mathrm{vac}\rangle = 0. \tag{11.112}$$

Коммутаторы с оператором (11.110) следуют из (11.108),

$$[\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a}, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{a}^\dagger. \tag{11.113}$$

Используя опыт предыдущего раздела, мы видим, что спектр оператора $\hat{N}$ образует *лестницу* с шагом $\lambda = 1$, где $\hat{a}$ является *понижающим* оператором по отношению к $\hat{N}$, а $\hat{a}^\dagger$ является *повышающим* оператором. Если $|n\rangle$ собственное состояние $\hat{N}$, мы имеем, как и в (11.101),

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \hat{N}\Big(\hat{a}|n\rangle\Big) = (n-1)\Big(\hat{a}|n\rangle\Big), \quad \hat{N}\Big(\hat{a}^\dagger|n\rangle\Big) = (n+1)\Big(\hat{a}^\dagger|n\rangle\Big). \tag{11.114}$$

Продолжая двигаться по лестнице вниз с помощью понижающего оператора $\hat{a}$, мы можем прийти в противоречие с требованием (11.111), так как собственное значение N может стать отрицательным. Этого можно избежать, лишь если при достижении нижней ступени лестницы $|n_{\rm min}\rangle$ дальнейшее применение понижающего оператора даёт нулевой вектор. По определению (11.112), низшее состояние лестницы является вакуумным, $|n_{\rm min}\rangle = |{\rm vac}\rangle$. Поскольку норма состояния $\hat{a}|{\rm vac}\rangle$ равна нулю, получаем

$$\langle{\rm vac}|\hat{N}|{\rm vac}\rangle = n_{\rm min} = 0. \tag{11.115}$$

Лестница заканчивается внизу на состоянии $|{\rm vac}\rangle = |n = 0\rangle \equiv |0\rangle$. Поднимаясь от этого состояния с помощью повышающего оператора $\hat{a}^\dagger$, мы можем восстановить всю лестницу с целочисленными ступенями, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Лестница бесконечна в направлении вверх, и мы можем назвать состояния $|n\rangle$ *состояниями с определённым числом возбуждений.*

Чтобы закончить построение, нам нужно найти матричные элементы соответствующих операторов, предполагая, что состояния лестницы $|n\rangle$ должным образом нормированы, $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$. Понижающий и повышающий операторы действуют согласно

$$\hat{a}|n\rangle = \mu_n|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \tilde{\mu}_n|n+1\rangle. \tag{11.116}$$

Здесь величина $\tilde{\mu}_n$ просто связана с μ_n:

$$\tilde{\mu}_n = \langle n+1|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{a}|n+1\rangle^* = \mu^*_{n+1}. \tag{11.117}$$

Чтобы найти эти матричные элементы, нам нужно *нелинейное* соотношение, например,

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = n = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger|n-1\rangle\langle n-1|\hat{a}|n\rangle = \tilde{\mu}_{n-1}\mu_n = |\mu_n|^2. \quad (11.118)$$

Фаза матричных элементов произвольна, поэтому они могут быть взяты вещественными,

$$\mu_n = \sqrt{n}, \quad \tilde{\mu}_n = \sqrt{n+1}. \quad (11.119)$$

Теперь все матричные элементы определены,

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (11.120)$$

Задача 11.8

Показать, что вся лестница нормированных состояний, начиная с вакуумного состояния $|0\rangle$, строится как

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (11.121)$$

Здесь у нас подходящий момент, чтобы перейти к языку *квантов осциллятора*. Квантовое число n указывает на число одинаковых квантов, имеющихся в состоянии $|n\rangle$, так что $\hat{N}$ является *оператором числа квантов*. Понижающий оператор $\hat{a}$ описывает *поглощение* кванта; все n квантов идентичны и вероятность поглощения пропорциональна $|\mu_n|^2 = n$, т. е. количеству имеющихся квантов. Повышающий оператор описывает *испускание* кванта, соответствующая вероятность пропорциональна $|\tilde{\mu}_n|^2 = n+1$ и состоит из складываемых некогерентно вероятности *спонтанного* излучения, которое не зависит от числа существующих квантов, и вероятности *индуцированного* или *вынужденного* излучения, пропорционального n; возможность вынужденного излучения лежит в основе лазерной физики. На языке квантов мы говорим о повышающих и понижающих операторах как об операторах *рождения* и *уничтожения* соответственно.

Задача 11.9

Доказать, что для любой функции F справедливо операторное тождество

$$e^{\lambda\hat{a}}F(\hat{a}^\dagger)e^{-\lambda\hat{a}} = F(\hat{a}^\dagger + \lambda). \quad (11.122)$$

11.9 Операторное решение для гармонического осциллятора

Алгебра Гейзенберга-Вейля открывает путь квантования фазового пространства одномерного движения. В применении к гармоническому осциллятору этот способ приводит к полному решению проблемы, которое проще, чем с помощью дифференциального уравнения второго порядка.

Задача 11.10

Вывести альтернативную форму соотношения неопределённостей,

$$\left\langle \nu^2 x^2 + \frac{p^2}{\nu^2} \right\rangle \geqslant \hbar, \tag{11.123}$$

где среднее значение берётся в произвольном состоянии и ν^2 – произвольный положительный параметр размерности $[m\omega]$.

Решение.

Выразить оператор $\hat{N}$ через операторы координаты и импульса (11.107):

$$\hat{N} = \frac{1}{2\hbar}\left(\nu^2 \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{\nu^2}\right) - \frac{1}{2}. \tag{11.124}$$

Задача 11.11

Показать, что для любого нормированного состояния частицы имеет место неравенство

$$\langle(\hat{x} - x_0)^2\rangle \langle(\hat{p} - p_0)^2\rangle - \langle(\hat{x} - x_0)(\hat{p} - p_0)\rangle^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{4}, \tag{11.125}$$

где

$$x_0 = \langle\hat{x}\rangle, \quad p_0 = \langle\hat{p}\rangle. \tag{11.126}$$

Выбрав параметр масштаба $\nu = \sqrt{m\omega}$ с фактическими массой и частотой гармонического осциллятора, из (11.124) получаем выражение для гамильтониана гармонического осциллятора через оператор числа квантов с этими параметрами,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right). \tag{11.127}$$

Квантование оператора числа квантов эквивалентно квантованию (11.15) спектра энергии гармонического осциллятора. Стационарные состояния — это найденные выше состояния с определённым числом квантов.

Теперь легко найти собственные функции ψ_n в координатном или импульсном представлении. В координатном представлении оператор уничтожения (11.107) имеет вид ($\nu = \sqrt{m\omega}$)

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right). \tag{11.128}$$

Вакуумное состояние $|n = 0\rangle$ уничтожается этим оператором, что даёт в координатном представлении уравнение для $\langle x|0\rangle \equiv \psi_0(x)$,

$$\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0(x) = 0. \tag{11.129}$$

Гораздо проще решать это уравнение первого порядка, чем задачу Шрёдингера второго порядка на собственные значения (энергетический спектр уже найден в (11.127) и (11.118)). Решение (11.129) с точностью до нормировочной константы очевидно:

$$\psi_0(x) = \text{const}\cdot e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \tag{11.130}$$

как мы уже знаем из уравнений (11.6) и (11.16). Используя общий результат (11.121) и оператор рождения, сопряжённый с (11.128), мы можем построить возбуждённые состояния

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{(2\hbar m\omega)^{n/2}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)^n \psi_0(x). \tag{11.131}$$

Все состояния будут автоматически нормированы, если вакуумное состояние было нормировано выбором постоянной в (11.130). Мы можем также рассматривать уравнение (11.131) как конструктивный способ получения полиномов Эрмита.

Задача 11.12

Найти оператор, который, действуя на состояние вакуума, создаёт локализованное состояние $|x\rangle$.

Решение.

Используя полный набор координатных волновых функций $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ (уравнение (11.58), операторное представление вектора состояния

$|n\rangle$ (уравнение (11.121)) и производящую функцию полиномов Эрмита (уравнение (11.44)), находим

$$|x\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|x\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega x^2/2\hbar)+\sqrt{2m\omega/\hbar}\,x\hat{a}^\dagger-(\hat{a}^\dagger)^2/2}|0\rangle. \quad (11.132)$$

Вся конструкция с операторами рождения и уничтожения тривиально переносится на многомерные случаи. Для каждой декартовой степени свободы операторы $\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger$ определены как в уравнении (11.127) с правилами коммутации

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (11.133)$$

Например, в двумерном случае гамильтониан (11.66) принимает вид

$$\hat{H} = \hbar\omega_x\left(\hat{N}_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(\hat{N}_y + \frac{1}{2}\right), \quad (11.134)$$

где мы вводим операторы числа квантов N_i с неотрицательным целочисленным спектром для каждой моды i,

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i. \quad (11.135)$$

Задача 11.13

Для двумерного гармонического осциллятора в плоскости xy с различными частотами $\omega_x \neq \omega_y$ выразить оператор углового момента $\hat{\ell}_z$ через операторы рождения и уничтожения. Рассмотреть предельный переход к изотропному случаю $\omega_x = \omega_y$ и показать, что этот оператор становится интегралом движения в соответствии с разделом 11.6.

Дополнительная литература: [24, 25, 57].

Будучи результатом предсказаний и
наблюдений, состояния света, включая так
называемый «сжатый свет», порождают
корреляционные эффекты, совершенно
необъяснимые с точки зрения классической
волновой теории.

М. П. Сильверман, «Далеко не одна тайна»

Глава 12

Когерентные и сжатые состояния

12.1 Определение когерентных состояний

Операторы рождения и уничтожения, использовавшиеся в главе 11, связаны с образом классической фазовой плоскости (x, p). Если бы они были комплексными числами α и α^*, а не операторами $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$, можно было бы ввести абсолютное значение и фазу, $\alpha = |\alpha| \exp(i\varphi)$, и найти классическую координату и сопряжённый импульс (11.109) как реальную и мнимую части изображающей точки на комплексной плоскости,

$$x = \frac{\sqrt{2\hbar}}{\nu} |\alpha| \cos\varphi, \quad p = \sqrt{2\hbar}\,\nu|\alpha| \sin\varphi. \tag{12.1}$$

Элемент площади на фазовой плоскости может быть выражен как

$$dS = dx\,dp = 2\hbar\, d(\operatorname{Re}\alpha)\, d(\operatorname{Im}\alpha) = 2\hbar d^2\alpha, \tag{12.2}$$

поэтому величина

$$\frac{d^2\alpha}{\pi} = \frac{dx\,dp}{2\pi\hbar} \tag{12.3}$$

имеет очевидный смысл — она подсчитывает (раздел 3.8) число квантовых состояний, квазиклассически соответствующих площади $dx\,dp$. Таким образом, комплексная плоскость α — это, по существу, классическая фазовая плоскость. Наша задача будет заключаться в том, как найти её квантовый аналог.

Ближе всего к классическому движению находятся *когерентные состояния*, которые определяются как собственные состояния оператора *уничтожения*. Такому состоянию $|\alpha\rangle$ может быть сопоставлено произ-

вольное комплексное число α, которое является собственным значением оператора $\hat{a}$,

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \tag{12.4}$$

Теперь покажем, что можно построить хорошее (нормируемое) состояние (12.4) для любого α. Все эти состояния могут быть разложены по полному набору состояний с определённым числом квантов,

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha)|n\rangle, \tag{12.5}$$

с

$$\sum_n |C_n(\alpha)|^2 = 1. \tag{12.6}$$

Легко убедиться, что ряд (12.5) должен быть *бесконечным*: оператор $\hat{a}$ перемещает каждый член ряда на один шаг вниз и только бесконечный ряд может воспроизводить себя после этого. Это сразу показывает, что нормируемые собственные векторы оператора *рождения* $\hat{a}^\dagger$ не существуют: все члены ряда переходят на шаг вверх под действием $\hat{a}^\dagger$ и низшая ступень лестницы никогда не может быть восстановлена.

Задача 12.1

Покажите, что с точностью до общей фазы, которая не зависит от n, решение уравнений (12.4)–(12.6) есть

$$C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, C_0(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}\, \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \tag{12.7}$$

Состояния (12.4) для всех комплексных точек α называются *когерентными состояниями* одномерного движения. Объединяя уравнения (11.121) и (12.7), мы можем генерировать эти состояния из вакуума:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^n(\hat{a}^\dagger)^n}{n!}|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2+\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle. \tag{12.8}$$

Следует отметить, что фаза амплитуды $C_n(\alpha)$ (см. уравнение (12.7)) равна $n\varphi$, где φ — фаза собственного значения α. Компоненты волнового пакета (12.8) являются полностью синхронизированными с равными разностями

фаз φ между всеми смежными компонентами. Это объясняет термин «*когерентное состояние*».

12.2 Сдвиги на фазовой плоскости

Мы уже рассматривали в разделе 4.5 операторы сдвига $\hat{\mathcal{D}}(a)$ вдоль координатной оси. Обобщение этого оператора позволяет производить сдвиг в произвольном направлении на фазовой плоскости. Соответствующий параметр сдвига α является комплексным числом, а оператор может быть определён согласно

$$\hat{\mathcal{D}}(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}. \tag{12.9}$$

Для действительных α это наш старый оператор (4.54) с параметром сдвига $\sqrt{2/\hbar}(\alpha/\nu)$. Общий оператор сдвига (12.9) с комплексным α по-прежнему унитарен,

$$\hat{\mathcal{D}}^\dagger(\alpha) = \hat{\mathcal{D}}^{-1}(\alpha) = \hat{\mathcal{D}}(-\alpha). \tag{12.10}$$

В выражении (12.9) операторы рождения и уничтожения *запутаны*, что приводит к сложному степенному ряду. Это выражение можно упростить, *распутав* $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$, т. е. представляя этот оператор с помощью экспонент, которые содержат $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ по отдельности.

Задача 12.2

Покажите, что операторы, преобразуемые с помощью (12.9), действительно сдвигаются на комплексную постоянную,

$$\hat{\mathcal{D}}(\alpha)\hat{a}\hat{\mathcal{D}}^{-1}(\alpha) = \hat{a} - \alpha, \quad \hat{\mathcal{D}}(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{\mathcal{D}}^{-1}(\alpha) = \hat{a}^\dagger - \alpha^*. \tag{12.11}$$

Решение.

Стандартный способ решения таких задач начинается с введения вспомогательного параметра τ таким образом, что

$$\hat{a}(\tau) \equiv \hat{\mathcal{D}}(\tau\alpha)\hat{a}\hat{\mathcal{D}}^{-1}(\tau\alpha), \quad \hat{a}(0) = \hat{a}. \tag{12.12}$$

Теперь мы можем вычислить производную по τ. Производная правой части содержит коммутатор

$$[\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}, \hat{a}] = -\alpha, \tag{12.13}$$

так что

$$\frac{d\hat{a}(\tau)}{d\tau} = -\alpha \quad \rightsquigarrow \quad \hat{a}(\tau) = \hat{a}(0) - \alpha\tau = \hat{a} - \alpha\tau. \tag{12.14}$$

При $\tau = 1$ мы приходим к первому равенству (12.11).

Задача 12.3

Вывести распутанные формы оператора сдвига (12.9),

$$\hat{\mathcal{D}}(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}\, e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\, e^{-\alpha^*\hat{a}} = e^{|\alpha|^2/2}\, e^{-\alpha^*\hat{a}}\, e^{\alpha\hat{a}^\dagger}. \tag{12.15}$$

Первая форма (12.15) соответствует *нормальному упорядочению* операторов рождения и уничтожения, когда все операторы $\hat{a}$ помещаются справа от операторов $\hat{a}^\dagger$; вторая форма производит *анти-нормальное упорядочение.*

Задача 12.4

Установить правило умножения двух комплексных смещений,

$$\hat{D}(\alpha)\hat{D}(\beta) = e^{i\,\mathrm{Im}(\beta^*\alpha)}\, \hat{D}(\alpha+\beta). \tag{12.16}$$

Возвращаясь к виду (12.8) волновых функций когерентных состояний, мы видим, что когерентное состояние, соответствующее началу координат фазового пространства, $|\alpha = 0\rangle$, совпадает с состоянием вакуума $|n = 0\rangle$, тогда как произвольное когерентное состояние $|\alpha\rangle$ появляется в результате сдвига $\hat{\mathcal{D}}(\alpha)$ вакуумного состояния. Действительно, с помощью первой (нормальной) формы уравнения (12.15), когда все операторы уничтожения, расположенные справа, дают нуль, действуя на вакуумное состояние, получаем

$$|\alpha\rangle = \hat{\mathcal{D}}(\alpha)|0\rangle. \tag{12.17}$$

Согласно (12.16) любое комплексное смещение преобразует когерентное состояние в другое когерентное состояние с фиксированной фазой,

$$|\alpha+\beta\rangle = \hat{\mathcal{D}}(\alpha+\beta)|0\rangle = e^{-i\,\mathrm{Im}(\beta^*\alpha)}\, \hat{\mathcal{D}}(\alpha)|\beta\rangle = e^{i\,\mathrm{Im}(\beta^*\alpha)}\, \hat{\mathcal{D}}(\beta)|\alpha\rangle. \tag{12.18}$$

Фаза была фактически зафиксирована в первоначальном определении (12.9) оператора сдвига, поэтому она уже не произвольна в произведении (12.18).

Согласно нашему определению среднее значение оператора смещения в вакуумном состоянии есть

$$\langle 0|\hat{\mathcal{D}}(\alpha)|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}. \tag{12.19}$$

12.3 Свойства когерентных состояний

Прежде всего мы замечаем, что средние значения различных операторов в когерентном состоянии могут быть сразу же найдены, если оператор приведён к нормальной форме; пример мы уже видели в (12.19). Нормальная форма любой операторной функции возникает от последовательности коммутаторов, переносящей все операторы $\hat{a}$ вправо. В итоге мы приходим к выражению типа $\sum_{kl} f_{kl}(\hat{a}^\dagger)^k hata^l$, так что

$$\langle\alpha|\sum_{kl} f_{kl}(\hat{a}^\dagger)^k hata^l|\alpha\rangle = \sum_{kl} f_{kl}(\alpha^*)^k\alpha^l. \tag{12.20}$$

В частности, среднее значение числа квантов просто равно

$$\langle n\rangle \equiv \langle\alpha|\hat{N}|\alpha\rangle = |\alpha|^2. \tag{12.21}$$

Оно зависит только от величины сдвига от начала координат, но не от угла.

Задача 12.5

Докажите тождество для среднего значения произведения операторов в когерентном состоянии,

$$\langle\alpha|\hat{N}(\hat{N}-1)(\hat{N}-2)...(\hat{N}-k+1)|\alpha\rangle = \langle\alpha|(\hat{a}^\dagger)^k(\hat{a})^k|\alpha\rangle = |\alpha|^{2k}. \tag{12.22}$$

Из основного результата (12.8) находим распределение вероятностей P_n для числа квантов в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$,

$$P_n(\alpha) = |C_n(\alpha)|^2 = e^{-|\alpha|^2}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}; \tag{12.23}$$

это волновой пакет с *распределением Пуассона*,

$$P_n = e^{-\langle n\rangle}\frac{\langle n\rangle^n}{n!}. \tag{12.24}$$

Задача 12.6

Вычислить неопределённость числа квантов в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$.

Решение. Для распределения Пуассона характерно, что дисперсия равна среднему числу $\langle n\rangle$,

$$(\Delta n)^2 = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = \langle n\rangle. \tag{12.25}$$

Для когерентных состояний, локализованных далеко от начала координат, среднее число квантов велико, $\langle n\rangle = |\alpha|^2 \gg 1$, и неопределённость этого числа, хотя и растёт с числом квантов, становится *относительно малой*,

$$\frac{\Delta n}{\langle n\rangle} = \frac{\sqrt{\langle n\rangle}}{\langle n\rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle n\rangle}}. \tag{12.26}$$

Зависимость $1/\sqrt{n}$ характерна для статистических явлений в макроскопических системах с большим количеством компонентов, где роль флуктуаций *относительно* подавлена.

Задача 12.7

Для произвольного когерентного состояния найти дисперсии координаты и импульса и показать, что соотношение неопределённостей (6.163) между координатой и импульсом достигает своего минимума.

Когерентные состояния, локализованные в разных точках, не ортогональны. Перекрытие двух когерентных состояний равно

$$\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-(|\beta|^2+|\alpha|^2)/2}\sum_{nn'}\frac{\beta^{*\,n}}{\sqrt{n!}}\frac{\alpha^{n'}}{\sqrt{n'!}}\langle n|n'\rangle \tag{12.27}$$

или из-за ортогональности состояний с определённым n

$$\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-(|\beta|^2+|\alpha|^2)/2}\sum_{n}\frac{(\beta^*\alpha)^n}{n!} = e^{-(|\beta|^2+|\alpha|^2)/2+\beta^*\alpha}. \tag{12.28}$$

Квадрат перекрытия,

$$|\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\beta|^2-|\alpha|^2+\beta^*\alpha+\beta\alpha^*} = e^{-|\beta-\alpha|^2}, \tag{12.29}$$

падает как экспонента от квадрата расстояния между соответствующими точками комплексной плоскости, так что когерентные состояния, локализованные далеко друг от друга, почти ортогональны.

Из-за неортогональности у нас *слишком много* независимых когерентных состояний: по построению они определены в каждой комплексной точке. Их набор *переполнен*. Тем не менее можно записать разложение единицы, аналогичное условию полноты (6.49). Начиная с полного набора состояний с определённым n, мы можем вычислить интеграл по всей комплексной плоскости

$$\int d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \int d^2\alpha\, e^{-|\alpha|^2} \sum_{nn'} \frac{\alpha^{n'}\alpha^{*\,n}}{\sqrt{n!n'!}}\, |n'\rangle\langle n| \tag{12.30}$$

или, переходя к полярным координатам: $|\alpha| \equiv A$ и φ,

$$\int d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \int_0^\infty A\, dA\, e^{-A^2} \sum_{nn'} \frac{A^{n+n'}}{\sqrt{n!n'!}} \int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i(n'-n)\varphi}\, |n'\rangle\langle n|. \tag{12.31}$$

Интеграл по углу даёт $2\pi\delta_{n'n}$, а интеграл по A равен

$$\int_0^\infty dA\, e^{-A^2} A^{2n+1} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dt\, e^{-t} t^n = \frac{1}{2}\, n!. \tag{12.32}$$

Наконец,

$$\int d^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \pi |n\rangle\langle n| = \pi \hat{1}, \tag{12.33}$$

и разложение единицы в терминах когерентных состояний есть

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi}\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{1}. \tag{12.34}$$

Это согласуется с образом классической фазовой плоскости, что мы уже обсуждали (уравнение (12.3)) в начале этого раздела: в классических переменных (x, p) этот результат эквивалентен

$$\int \frac{dx\, dp}{2\pi\hbar}\, |x, p\rangle\langle x, p| = \hat{1}. \tag{12.35}$$

Если бы мы хотели охарактеризовать квазиклассические квантовые состояния с помощью центров локализации соответствующих когерентных состояний, то правильный рецепт подсчёта этого избыточного набора был бы приписать по одному представителю для каждого элемента площади

$dS = 2\pi\hbar$ в плоскости (x,p), т. е. рецепт, с которым мы уже неоднократно сталкивались.

12.4 Когерентные состояния гармонического осциллятора

Идентифицируя ν — параметр масштаба в определении (11.107) операторов рождения и уничтожения – с величиной $\sqrt{m\omega}$ физического гармонического осциллятора, мы определяем его когерентные состояния как волновые пакеты (12.8).

Главной особенностью этих состояний является простая зависимость от времени. В соответствии с общим правилом эволюция когерентного состояния, которое не есть стационарное состояние осциллятора,

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\alpha\rangle, \tag{12.36}$$

идёт через независимое изменение фаз монохроматических компонент,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\, e^{-(i/\hbar)E_n t}|n\rangle, \tag{12.37}$$

что для гармонического осциллятора сводится к

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-|\alpha|^2/2-(i/2)\omega t}\sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle. \tag{12.38}$$

Таким образом, когерентное состояние развивается как

$$|\alpha; t\rangle = e^{-(i/2)\omega t}|\alpha e^{-i\omega t}; 0\rangle. \tag{12.39}$$

За исключением несущественной общей фазы, центр когерентного состояния просто вращается вокруг начала координат по окружности радиуса $A = |\alpha|$ с угловой скоростью, равной частоте ω осциллятора. Состояние *остаётся когерентным* с вращающейся фазой. Это ближайшая аналогия классической траектории на фазовой плоскости гармонического осциллятора.

Средние значения координаты и импульса осциллируют, как в классической механике,

$$\langle\Psi(t)|\hat{x}|\Psi(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,|\alpha|\cos(\varphi-\omega t), \tag{12.40}$$

$$\langle\Psi(t)|\hat{p}|\Psi(t)\rangle = \sqrt{2\hbar m\omega}\,|\alpha|\sin(\varphi-\omega t). \tag{12.41}$$

Волновой пакет постоянно минимизирует соотношение неопределённостей.

12.5 Линейный источник

Когерентное состояние может быть физически порождено действием линейного источника, который излучает отдельные кванты поодиночке. В эрмитовой ситуации источник должен быть способен также и поглощать кванты с сопряженной амплитудой. Модель такого источника, в применении к гармоническому осциллятору, может быть описана гамильтонианом

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)+\lambda\hat{a}+\lambda^*\hat{a}^\dagger. \tag{12.42}$$

Естественно предположить, что стационарное состояние такого осциллятора будет иметь другую точку равновесия по сравнению со случаем отсутствия источника.

Математически мы выразим эту идею, совершая *каноническое преобразование* к новым операторам $\hat{b}$ и $\hat{b}^\dagger$, которые подчиняются той же алгебре:

$$\hat{a} = \hat{b}+\alpha, \quad \hat{a}^\dagger = \hat{b}^\dagger+\alpha^*, \tag{12.43}$$

где α — неизвестная комплексная постоянная. Канонический характер преобразования очевиден, так как добавленная постоянная не меняет коммутационные соотношения.

Преобразованный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{b}^\dagger\hat{b}+\frac{1}{2}\right)+\hat{b}(\hbar\omega\alpha^*+\lambda)+\hat{b}^\dagger(\hbar\omega\alpha+\lambda^*)+\hbar\omega|\alpha|^2+\lambda\alpha+\lambda^*\alpha^*. \tag{12.44}$$

Для того чтобы учесть присутствие источника в новых стационарных состояниях, мы выбираем параметр α таким образом, чтобы исключить *опасные* члены и сделать количество новых квантов сохраняющимся. Очевидно, что это может быть сделано, если

$$\alpha = -\frac{\lambda^*}{\hbar\omega}, \quad \alpha^* = -\frac{\lambda}{\hbar\omega}. \tag{12.45}$$

Новый гамильтониан опять принимает форму гамильтониана гармонического осциллятора без источника,

$$H = \hbar\omega\left(\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}\right) - \frac{|\lambda|^2}{\hbar\omega}. \tag{12.46}$$

Новые стационарные состояния являются состояниями с определённым количеством b-квантов. В частности, основное состояние, будучи вакуумом по отношению к b-квантам, удовлетворяет уравнению

$$\hat{b}|0_b\rangle = 0. \tag{12.47}$$

Тогда уравнение (12.43) показывает, что новый вакуум является когерентным состоянием старых квантов, локализованных около точки α, которая определяется интенсивностью источника с помощью уравнения (12.45),

$$\hat{a}|0_b\rangle = \alpha|0_b\rangle. \tag{12.48}$$

Хотя частота стационарных квантов («b-квантов»), которые описывают колебания вокруг нового центра, не изменилась, энергия всего спектра всегда понижается на

$$\Delta E = -\frac{|\lambda|^2}{\hbar\omega} \tag{12.49}$$

и переход к новой точке равновесия α делает систему более стабильной.

Задача 12.8

Постоянное однородное электрическое поле $\mathcal{E} = \mathcal{E}_x$ приложено к гармоническому осциллятору, несущему электрический заряд e. Найти новое основное состояние, показать, что это состояние является когерентным, и вычислить равновесный дипольный момент $\langle e\hat{x}\rangle$ частицы и *поляризуемость* (отношение индуцированного дипольного момента к полю).

Решение.

Поле действует как линейный источник: возмущение в гамильтониане имеет вид

$$-e\mathcal{E}\hat{x} = -e\mathcal{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \tag{12.50}$$

который определяет фактическое значение λ в (12.42). В результате имеет место сдвиг положения равновесия и спектра в целом,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - e\mathcal{E}\hat{x} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x - x_0)^2 - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \quad (12.51)$$

$$x_0 = \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}, \quad (12.52)$$

в соответствии с общими результатами. Новое основное состояние является когерентным состоянием с

$$\alpha = \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2\hbar m\omega^3}}. \quad (12.53)$$

Это соответствует среднему числу исходных a-квантов, поглощённых полем,

$$\langle n \rangle = \alpha^2 = \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3}, \quad (12.54)$$

а их энергия даётся уравнением (12.49):

$$\Delta E = -\frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} = -\langle n \rangle \hbar\omega. \quad (12.55)$$

Индуцированный дипольный момент определяется смещением (12.52),

$$d = ex_0 = \frac{e^2\mathcal{E}}{m\omega^2}, \quad (12.56)$$

что соответствует электрической поляризуемости

$$\chi = \frac{d}{\mathcal{E}} = \frac{e^2}{m\omega^2}. \quad (12.57)$$

Выигрыш энергии (12.55) можно классически интерпретировать в терминах работы, произведённой источником электрического поля на перемещении $x_0(\mathcal{E})$ точки равновесия,

$$\Delta E = -\int_0^{\mathcal{E}} d\mathcal{E} e x_0(\mathcal{E}). \quad (12.58)$$

12.6 Квазиклассический предел, число квантов и фаза

Даже для произвольного (негармонического) гамильтониана $H(\hat{x}, \hat{p})$ когерентные состояния могут нередко обеспечивать хорошее приближение для *квазиклассического движения*, по крайней мере в течение не очень больших промежутков времени. Точные операторные уравнения движения могут быть записаны для операторов рождения и уничтожения в символическом виде:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\,\hat{a} = [\hat{a}, \hat{H}] = \frac{\delta\hat{H}}{\delta\hat{a}^{\dagger}}, \quad i\hbar\frac{d}{dt}\,\hat{a}^{\dagger} = [\hat{a}^{\dagger}, \hat{H}] = -\frac{\delta\hat{H}}{\delta\hat{a}}, \tag{12.59}$$

где вместо обычных производных, как в классическом уравнении Гамильтона, мы использовали символ δ, показывая, что берём производные по каждому оператору, встречающемуся в $\hat{H}$, но сохраняем порядок всех остальных операторов. Например, в гармоническом случае это должно привести к

$$\frac{d}{dt}\,\hat{a} = -i\omega\hat{a}, \quad \frac{d}{dt}\,\hat{a}^{\dagger} = i\omega\hat{a}^{\dagger}, \tag{12.60}$$

так что эти операторы представляют собой *нормальные моды* с собственными частотами $\pm\omega$,

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}^{\dagger}(t) = \hat{a}^{\dagger}e^{i\omega t}, \tag{12.61}$$

в соответствии с (12.39).

В квазиклассической области больших $|\alpha| \gg 1$ правая сторона коммутатора (11.113) мала по сравнению со средними значениями $\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \hat{N}$ или $\hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{N} + 1$. Игнорируя коммутаторы с погрешностью $\sim 1/\langle n\rangle$, мы можем всегда поставить операторы в уравнениях движения в нормальной форме и взять матричные элементы в пробном когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ с

$$\alpha = \sqrt{N}e^{i\varphi}, \tag{12.62}$$

где мы теперь используем классическую переменную $N \gg 1$ вместо $\langle n\rangle$. Затем вариационные производные в уравнении (12.59) могут быть заменены обычными производными по отношению к классическим переменным.

Задача 12.9

Выразив H в терминах N и φ и рассматривая последние как классические функции времени, вывести уравнения движения

$$\dot{N} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial H}{\partial \varphi}, \tag{12.63}$$

$$\dot{\varphi} = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial H}{\partial N}. \tag{12.64}$$

Уравнения (12.63) и (12.64) показывают, что переменные N и φ, число квантов и фаза являются *канонически сопряжёнными* для квазиклассических волновых пакетов. Как это было для гармонического осциллятора, любой гамильтониан, который не зависит от фазы φ, $H = H(N)$ (фаза является *циклической переменной*), сохраняет число квантов. Это может произойти только тогда, когда операторы рождения и уничтожения входят в каждый член гамильтониана в одинаковых степенях. Как и любой глобальный закон сохранения (7.10), данный также связан с непрерывным унитарным преобразованием, которое оставляет гамильтониан инвариантным. В этом случае мы должны рассмотреть *преобразование фазы* операторов,

$$\hat{a} \to \hat{b} = \hat{a}e^{i\vartheta}, \quad \hat{a}^\dagger \to \hat{b}^\dagger = \hat{a}^\dagger e^{-i\vartheta}. \tag{12.65}$$

Это преобразование является *каноническим*, сохраняя коммутационные соотношения (11.113) неизменными. Операторное выражение $F(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ не меняется при фазовом преобразовании тогда и только тогда, когда оно содержит равное количество операторов рождения и уничтожения.

Задача 12.10

Найти унитарное преобразование $\hat{U}$, которое приводит к (12.65),

$$\hat{U}\hat{a}\hat{U}^{-1} = \hat{b}, \quad \hat{U}\hat{a}^\dagger\hat{U}^{-1} = \hat{b}^\dagger. \tag{12.66}$$

Решение.

Оператор числа $\hat{N}$ является *генератором* этого преобразования (раздел 6.10),

$$\hat{U}(\vartheta) = e^{-i\vartheta\hat{N}}. \tag{12.67}$$

Как всегда в таких случаях, генератор непрерывного преобразования симметрии сохраняется.

Из-за формальной аналогии между парой $(N, \hbar\varphi)$ канонически сопряжённых переменных и парой (p, x) может возникнуть идея ввести соответ-

ствующие *квантовые операторы* $\hat{N}$ и $\hat{\varphi}$. Их коммутационное соотношение было бы

$$[\hat{\varphi}, \hat{N}] = i. \tag{12.68}$$

Тем не менее, это невозможно: нам известен квантовый оператор $\hat{N}$ и его собственные состояния $|n\rangle$; взяв матричный элемент $\langle n|...|n'\rangle$ в операторном тождестве (12.68), мы приходим к

$$\langle n|\hat{\varphi}|n'\rangle(n' - n) = i\delta_{nn'}. \tag{12.69}$$

При $n = n'$ правая часть равна i, в то время как левая часть обращается в нуль, за исключением возможности бесконечно больших диагональных матричных элементов $\hat{\varphi}$. Но фаза представляет собой *компактную* переменную с нетривиальным диапазоном изменения только от 0 до 2π. Поэтому формальное соотношение неопределённостей

$$\Delta\varphi \cdot \Delta N \geqslant \frac{1}{2} \tag{12.70}$$

также не имеет смысла, так как неопределённость фазы не может бесконечно расти, когда мы переходим в состояние с определённым значением N. Уравнение (12.70) нарушается уже для когерентного состояния, которое имеет определенное значение фазы, $\Delta\varphi = 0$, и *конечную* дисперсию количества квантов (см. уравнение (12.25)).

В разделе 4.7 мы уже обсуждали похожую ситуацию, касающуюся орбитального момента и сопряжённого угла. В нашем распоряжении нет фазовой переменной с бесконечным диапазоном значений. По сути мы должны ограничиться *периодическими* функциями фазы с периодом 2π. Тем не менее в квазиклассическом случае мы можем говорить о состояниях, похожих на когерентные, с почти точно определённой фазой и малыми *относительными* флуктуациями числа квантов (12.26). Поле лазера является примером, близким к этой ситуации.

12.7 Двухквантовый источник

Состояние, отличающееся от когерентного, может быть порождено источником, который создаёт и поглощает кванты *попарно*. По аналогии с (12.42)

мы можем написать модельный гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \lambda\hat{a}\hat{a} + \lambda^*\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger, \tag{12.71}$$

где λ характеризует интенсивность источника. По сути это наиболее общая эрмитова однородная (без линейных членов) квадратичная форма, построенная из операторов рождения и уничтожения; линейные члены всегда могут быть устранены смещением (12.43).

Гамильтониан типа (12.71) может быть точно *диагонализован* с помощью операторного *канонического преобразования Боголюбова*. Здесь диагонализация означает сведение к простой форме гармонического осциллятора для новых квантов, т. е. определение стационарных состояний для системы *исходных осцилляторов при наличии источника*. Преобразование объединяет в общей форме операторы рождения и уничтожения,

$$\hat{a} = u\hat{b} + v\hat{b}^\dagger, \quad \hat{a}^\dagger = u^*\hat{b}^\dagger + v^*\hat{b}. \tag{12.72}$$

Здесь u и v — неизвестные комплексные амплитуды, а преобразование сохраняет эрмитовость соотношений. Для того, чтобы сделать преобразование *каноническим*, мы должны гарантировать те же коммутационные соотношения для новых операторов,

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \tag{12.73}$$

Тогда, как легко найти, свобода выбора амплитуд преобразования ограничена условием

$$|u|^2 - |v|^2 = 1. \tag{12.74}$$

Задача 12.11

Показать, что преобразование, обратное к (12.72), имеет вид

$$\hat{b} = u^*\hat{a} - v\hat{a}^\dagger, \quad \hat{b}^\dagger = u\hat{a}^\dagger - v^*\hat{a}. \tag{12.75}$$

Преобразованный гамильтониан содержит члены с различными комбинациями новых операторов рождения и уничтожения,

$$\hat{H} = \hat{H}_{20} + \hat{H}_{02} + \hat{H}_{11} + \frac{1}{2}\hbar\omega, \tag{12.76}$$

где

$$\hat{H}_{20} = \hat{H}_{02}^{\dagger} = \hat{b}\hat{b}(\hbar\omega v^* u + \lambda u^2 + \lambda^* v^{*2}) \tag{12.77}$$

и

$$\hat{H}_{11} = \hat{b}^{\dagger}\hat{b}(\hbar\omega|u|^2 + \lambda uv + \lambda^* u^* v^*) + \hat{b}\hat{b}^{\dagger}(\hbar\omega|v|^2 + \lambda uv + \lambda^* u^* v^*). \tag{12.78}$$

Состояние с определённым количеством новых квантов будет стационарным, если *опасные члены* рождения и уничтожения пар квантов сокращаются. Это приводит к условию

$$\hat{H}_{20} = \hat{H}_{02} = 0 \tag{12.79}$$

или в явном виде к

$$\hbar\omega v^* u + \lambda u^2 + \lambda^* v^{*2} = 0. \tag{12.80}$$

Если ввести фазы комплексных амплитуд,

$$\lambda = \Lambda e^{i\gamma_\lambda}, \quad u = U e^{i\gamma_u}, \quad v = V e^{i\gamma_v}, \tag{12.81}$$

условие компенсации (12.80) принимает вид

$$\hbar\omega UV e^{i(\gamma_u - \gamma_v)} + \Lambda U^2 e^{i(\gamma_\lambda + 2\gamma_u)} + \Lambda V^2 e^{-i(\gamma_\lambda + 2\gamma_v)} = 0. \tag{12.82}$$

Теперь мы можем выбрать фазы согласно

$$\gamma_u = \gamma_v = -\frac{1}{2}\,\gamma_\lambda \tag{12.83}$$

и работать с действительными амплитудами Λ, U и V.

Для решения полученных уравнений удобно параметризовать амплитуды таким образом, чтобы учесть условие нормировки (12.74):

$$U = \cosh\left(\frac{\chi}{2}\right), \quad V = \sinh\left(\frac{\chi}{2}\right). \tag{12.84}$$

Гиперболический угол χ определяется из уравнения (12.82),

$$\begin{aligned}&\Lambda\cosh\chi+\frac{\hbar\omega}{2}\sinh\chi=0, \quad \rightsquigarrow \quad \tanh\chi=-\frac{2\Lambda}{\hbar\omega},\\&\chi=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{\hbar\omega-2\Lambda}{\hbar\omega+2\Lambda}\right).\end{aligned} \tag{12.85}$$

Это определяет

$$\sinh\chi=-\frac{2\Lambda}{\sqrt{(\hbar\omega)^2-4\Lambda^2}}, \quad \cosh\chi=\frac{\hbar\omega}{\sqrt{(\hbar\omega)^2-4\Lambda^2}}. \tag{12.86}$$

Заметим, что стационарное состояние возможно, если источник не слишком интенсивный,

$$\Lambda^2<\frac{(\hbar\omega)^2}{4}. \tag{12.87}$$

В области стабильности оставшийся член $\hat{H}_{11}$ (уравнение (12.78)) определяет новую частоту и смещение спектра (оператор $\hat{b}\hat{b}^\dagger$ должен быть записан в виде $\hat{b}^\dagger\hat{b}+1$),

$$\hbar\omega_b=4\Lambda UV+\hbar\omega(U^2+V^2)=2\Lambda\sinh\chi+\hbar\omega\cosh\chi. \tag{12.88}$$

С помощью простых алгебраических преобразований, используя уравнения (12.84) и (12.85), находим

$$\hbar\omega_b=\sqrt{(\hbar\omega)^2-4\Lambda^2}. \tag{12.89}$$

Мы видим опять, что стационарность спектра требует такое же условие стабильности (12.86). С подобной алгеброй мы также можем вычислить энергию нулевых колебаний нового спектра

$$E_0=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+V^2\right)+2\Lambda UV=\frac{1}{2}\hbar\omega_b. \tag{12.90}$$

Задача 12.12

Рассмотреть задачу (12.71) в (x,p)-представлении и интерпретировать физическую причину нестабильности, когда (12.87) нарушается.

Задача 12.13

Записать операторные уравнения движения для $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$, найти нормальные моды $\hat{b}(t)$, $\hat{b}^\dagger(t)$ с монохроматической зависимостью от времени, как собственные операторы гамильтониана, аналогично (12.60) для осциллятора без внешнего источника, а также установить эквивалентность результатам канонического преобразования.

Задача 12.14

Рассмотреть систему с линейной связью двух одинаковых гармонических осцилляторов,

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b}) + \lambda(\hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{a}). \tag{12.91}$$

Найти энергетический спектр системы; выразить стационарные состояния в терминах исходных операторов.

Решение.

Гамильтониан задачи диагонализуется переходом к новым нормальным модам,

$$\hat{a} = \frac{\hat{c} + \hat{d}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{b} = \frac{\hat{c} - \hat{d}}{\sqrt{2}}. \tag{12.92}$$

Преобразованный гамильтониан имеет две независимых колебательных моды,

$$\hat{H} = (\hbar\omega + \lambda)\hat{c}^\dagger\hat{c} + (\hbar\omega - \lambda)\hat{d}^\dagger\hat{d}. \tag{12.93}$$

Вырождение снимается отталкиванием уровней, $\hbar\omega \Rightarrow \hbar\omega \pm \lambda$. Заметим, что при $|\lambda| > \hbar\omega$ одна из новых частот отрицательна (система неустойчива). В области устойчивости новые стационарные состояния можно записать как

$$|n_c n_d\rangle = \frac{(\hat{c}^\dagger)^{n_c}(\hat{d}^\dagger)^{n_d}}{\sqrt{n_c! n_d!}}|0_c 0_d\rangle, \tag{12.94}$$

но вакуум для c- и d-мод такой же, как старый вакуум для a- и b-мод. Поэтому

$$|n_c n_d\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger + \hat{b}^\dagger)^{n_c}(\hat{a}^\dagger - \hat{b}^\dagger)^{n_d}}{2^{(n_c+n_d)/2}} \frac{1}{\sqrt{n_c! n_d!}}|00\rangle \tag{12.95}$$

и биномы можно алгебраически раскрыть, так как операторы рождения коммутируют друг с другом.

12.8 Сжатые состояния

Каноническое преобразование (12.72), (12.74), используемое для состояний, порожденных парным источником, создаёт так называемые сжатые состояния. Как указывается в [58], в отличие от квазиклассических когерентных состояний, «сжатые состояния света лежат вне области любой классической теории поля». Рассмотрим собственное состояние $|\xi\rangle$ оператора $\hat{b}$, определённого формулой (12.72),

$$\hat{b}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle, \tag{12.96}$$

с комплексным собственным значением ξ. Это когерентное состояние, но по отношению к новому оператору в отличие от когерентных состояний $|\alpha\rangle$ исходного оператора $\hat{a}$.

Состояния, такие как (12.96), являются *сжатыми* по отношению к исходным состояниям гармонического осциллятора, порожденным операторами рождения $\hat{a}^\dagger$. Координаты и импульсы подвергаются *масштабному преобразованию*,

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[(u+v^*)\hat{b} + (u^*+v)\hat{b}^\dagger], \\ \hat{p} &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}[(u-v^*)\hat{b} + (-u^*+v)\hat{b}^\dagger]. \end{aligned} \tag{12.97}$$

Как и в когерентных состояниях, средние значения $\hat{x}$ и $\hat{p}$ в сжатом состоянии определяются по формулам (12.97) с заменой $\hat{b} \to \xi$, $\hat{b}^\dagger \to \xi^*$. Неопределенности x и p равны

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,|u+v|, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,|u-v|. \tag{12.98}$$

Эти результаты следуют из коммутатора (12.73), и поэтому они справедливы для любого выбора сжатого состояния (значение ξ). Произведение неопределённостей равно

$$(\Delta x)(\Delta p) = \frac{\hbar}{2}\,|u^2 - v^2|. \tag{12.99}$$

Предел когерентного состояния соответствует $|u| = 1, v = 0$, когда состояние имеет минимум неопределённости $\hbar/2$. В общем случае комплексных u и v

$$|u^2 - v^2| \geqslant |u|^2 - |v|^2 = 1. \tag{12.100}$$

(Это становится очевидным, если явно ввести относительные фазы между u и v; в примере раздела 12.7 эта фаза была исключена (12.83).) Таким образом, в общем сжатом состоянии неопределённость произведения (12.99) превышает квантовый предел $\hbar/2$. Тем не менее неопределённость только в координате (или импульсе) может быть сделана меньше, чем для основного состояния гармонического осциллятора, выбором u и v, эта неопределённость *сжата*.

Общее определение *сжатого состояния* $|\alpha; z\rangle$ включает в себя как сдвиг $\hat{\mathcal{D}}(\alpha)$, так и и сжатие с помощью оператора

$$\hat{\mathcal{S}}(z) = e^{z\hat{K}_+ - z^*\hat{K}_-}, \tag{12.101}$$

где

$$z = |z|e^{i\vartheta} \equiv re^{i\vartheta} \text{ —} \tag{12.102}$$

произвольное комплексное число, и мы ввели операторы для парного источника,

$$\hat{K}_- = \frac{1}{2}\,\hat{a}\hat{a}, \quad \hat{K}_+ = \frac{1}{2}\,\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger. \tag{12.103}$$

Тогда сжатое состояние определяется двумя комплексными параметрами z и α как

$$|\alpha; z\rangle = \hat{\mathcal{S}}(z)|\alpha\rangle = \hat{\mathcal{S}}(z)\hat{\mathcal{D}}(\alpha)|0\rangle; \tag{12.104}$$

$z = 0$ соответствует когерентному состоянию $|\alpha; 0\rangle = |\alpha\rangle$. Оператор (12.101) является унитарным по построению, $\hat{\mathcal{S}}^\dagger(z) = \hat{\mathcal{S}}^{-1}(z) = \hat{\mathcal{S}}(-z)$, и, следовательно, новые операторы $\hat{b}, \hat{b}^\dagger$, полученные сжатием,

$$\hat{\mathcal{S}} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix} \hat{\mathcal{S}}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{b} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix}, \tag{12.105}$$

удовлетворяют тем же каноническим коммутационным соотношениям, что и $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$.

Задача 12.15

Показать, что операторы (12.103) вместе с оператором

$$\hat{K}_0 = \frac{1}{2}\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \tag{12.106}$$

удовлетворяют замкнутой алгебре коммутационных соотношений

$$[\hat{K}_0, \hat{K}_\pm] = \pm\hat{K}_\pm, \quad [\hat{K}_-, \hat{K}_+] = 2\hat{K}_0 \tag{12.107}$$

так называемой $\mathcal{SU}(1,1)$ алгебры, которая близка к алгебре углового момента, но отличается от неё (см. главу 1 том II).

Теперь очевидно, что оператор $\hat{b}$, полученный преобразованием (12.105), действительно имеет состояние $|\alpha; z\rangle$ в качестве своего собственного состояния (см. уравнение (12.96)), с собственным значением $\xi = \alpha$,

$$\hat{b}|\alpha; z\rangle = \hat{\mathcal{S}}(z)\hat{a}\hat{\mathcal{S}}^\dagger(z)\hat{\mathcal{S}}(z)|\alpha\rangle = \hat{\mathcal{S}}(z)\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha; z\rangle. \tag{12.108}$$

Однако как мы видели в (12.99), сжатое состояние *не является* состоянием с минимальной неопределённостью.

Задача 12.16

Найти явный вид нового оператора $\hat{b}$, полученного путём преобразования, заданного формулами (12.101), (12.102) и (12.105).

Решение.

С использованием алгебраических методов распутывания операторов (раздел 4.8), найдите коэффициенты соответствующего канонического преобразования (сравните с (12.75))

$$\hat{b} = \cosh(r)\hat{a} - \sinh(r)e^{-i\vartheta}\hat{a}^\dagger. \tag{12.109}$$

Задача 12.17

Найти произведение неопределённостей в состоянии $|\alpha; r\,\exp(i\vartheta)\rangle$.

Решение.

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\,[1 + \sinh^2(2r)\,\sin^2\vartheta]. \tag{12.110}$$

Это выражение при $r = 0$ сводится к минимальному значению, как должно быть в когерентном состоянии. Минимальное значение также достигается для вещественного параметра сжатия $\vartheta = n\pi$.

Задача 12.18

Докажите, что для вещественного $z = r$ преобразование $\hat{\mathcal{S}}(r)$ эквивалентно сжатию вдоль оси координат в фазовом пространстве,

$$\hat{x} \Rightarrow \hat{x}e^{r}, \quad \hat{p} \Rightarrow \hat{p}e^{-r}. \tag{12.111}$$

12.9 Подробнее о сжатых состояниях

Рассмотрим чистое сжатое состояние

$$\hat{\mathcal{S}}(z)|0\rangle = |0; z\rangle. \tag{12.112}$$

Парный источник преобразует вакуум $|0\rangle$ в сложную суперпозицию различного, но только *чётного* количества квантов,

$$|0; z\rangle = \sum_{n} C_n(r, \vartheta)|2n\rangle. \tag{12.113}$$

Эта комбинация является вакуумом новых операторов $\hat{b}$, т. е. она удовлетворяет

$$\hat{b}|z\rangle = 0. \tag{12.114}$$

Среднее число квантов $\langle \hat{N} \rangle$ может быть найдено без использования точного вида коэффициентов C_n,

$$\langle 0; z|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|0; z\rangle = \langle 0|\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(z)\hat{a}^{\dagger}\hat{\mathcal{S}}(z)\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(z)\hat{a}\hat{\mathcal{S}}(z)|0\rangle. \tag{12.115}$$

Из преобразования, которое отличается от (12.109) заменой $z \to -z$, мы находим

$$\begin{aligned}\langle 0; z|\hat{N}|0; z\rangle = &\langle 0|[\hat{a}^{\dagger}\cosh(r) - \hat{a}e^{i\vartheta}\sinh(r)]\times \\ &\times [\hat{a}\cosh(r) - \hat{a}^{\dagger}e^{-i\vartheta}\sinh(r)]|0\rangle,\end{aligned} \tag{12.116}$$

и, наконец,

$$\langle 0; z|\hat{N}|0; z\rangle \equiv \langle n\rangle = \sinh^2(r). \tag{12.117}$$

Используя те же методы, мы можем вычислить неопределённость числа квантов, которая оказывается гораздо больше, чем в когерентном состоянии с распределением Пуассона (12.25). В самом деле,

$$\langle 0; z|\hat{N}^2|0; z\rangle = \langle 0; z|\hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{a}^\dagger \hat{a}|0; z\rangle, \tag{12.118}$$

и, используя явный вид преобразования $\hat{\mathcal{S}}(z)$ и переходя к среднему значению преобразованных операторов в старом вакуумном состоянии $|0\rangle$, мы находим

$$\langle 0; z|\hat{N}^2|0; z\rangle \equiv \langle n^2\rangle = \sinh^2(r)[\sinh^2(r) + 2\cosh^2(r)]. \tag{12.119}$$

Сравнение с (12.117) показывает увеличение флуктуаций числа квантов:

$$(\Delta n)^2 = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = 2\langle n\rangle\Big(\langle n\rangle + 1\Big). \tag{12.120}$$

Задача 12.19

Определить коэффициенты суперпозиции (12.113) и проверить нормировку и среднее число квантов (12.117).

Решение.

Используя явную форму (12.113), найдём нормированные коэффициенты

$$C_n(r, \vartheta) = \frac{\sqrt{(2n)!}}{\sqrt{\cosh(r)}\, n! 2^n}\Big(-e^{-i\vartheta}\tanh(r)\Big)^n. \tag{12.121}$$

Как и в случае когерентного состояния фаза коэффициента C_n равна $-n\vartheta$, так что компоненты комбинации снова точно синхронизированы. Как следует из (12.121), сжатый волновой пакет может содержать чётные номера, $2n$, квантов с вероятностью

$$W_{2n} = |C_n|^2 = \frac{(2n)![\tanh(r)]^{2n}}{\cosh(r)(n!)^2 2^{2n}}. \tag{12.122}$$

Для проверки условий

$$\sum_n W_{2n} = 1, \quad \sum_n 2nW_{2n} = \sinh^2(r) \tag{12.123}$$

можно использовать ряд Тейлора ($x \to \tanh(r)$)

$$\sum_{n=0} \frac{(2n)!}{(n!)^2 2^{2n}} x^{2n} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}. \tag{12.124}$$

Зависимость от времени первоначально построенного сжатого состояния гармонического осциллятора является более сложной, чем простое вращение фазы (12.39). Используя явное разложение сжатого состояния по состояниям с определённым числом квантов, мы получаем

$$|\alpha; z\rangle_t = |\alpha e^{-i\omega t}; z e^{-2i\omega t}\rangle. \tag{12.125}$$

Первоначально сжатое состояние осциллятора сохраняет свою сжатую природу. В моменты времени $t_n = (n\pi - \vartheta)/2\omega$ параметр сжатия периодически пересекает вещественную ось и осциллятор возвращается в состояние с минимальной неопределённостью.

Несколько иной взгляд на сжатое состояние соответствует детектору, который по построению считает новые b-кванты. Пусть $\langle a^\dagger a\rangle = n_a$ есть количество старых a-квантов в исследуемом состоянии; тогда в соответствии с (12.109) b-детектор будет регистрировать

$$n_b = \langle \hat{b}^\dagger \hat{b}\rangle = \cosh^2(r)\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}\rangle + \sinh^2(r)\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger\rangle \tag{12.126}$$

или, используя коммутационные соотношения,

$$n_b = \sinh^2(r) + [\sinh^2(r) + \cosh^2(r)]n_a. \tag{12.127}$$

В частности, для вакуумного состояния, $n_a = 0$,

$$n_b = \sinh^2(r) = \frac{1}{\coth^2(r) - 1}. \tag{12.128}$$

Мы всегда можем записать этот результат в виде *теплового равновесия* для числа квантов,

$$n_b = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T_{\text{eff}}} - 1}, \tag{12.129}$$

и интерпретировать выход детектора как указание на *эффективную температуру*, T_{eff}, источника квантов, определив

$$\tanh(r) = e^{-\hbar\omega/2T_{\text{eff}}}. \qquad (12.130)$$

Такая ситуация возникает в общей теории относительности [59], когда равномерно ускоряющийся наблюдатель (например, в свободном падении в гравитационном поле) регистрирует вакуумное состояние (для наблюдателя в состоянии покоя) как равновесное состояние фотонов с $T_{\text{eff}} = \hbar g/2\pi c$, где g — ускорение (*эффект Унру* [60]). Преобразование квантов между двумя системами совпадает с уравнением (12.72). В применении к чёрным дырам этот фотон поля соответствует тому, что называется *излучением Хокинга* с температурой, определённой по массе чёрной дыры. Однако следует отметить, что обычное излучение чёрного тела характеризуется *распределением Планка*

$$W_n^{\text{Pl}} = e^{-n\hbar\omega/T}[1 - e^{-\hbar\omega/T}], \quad \sum_n W_n^{\text{Pl}} = 1, \qquad (12.131)$$

где все чётные и нечётные числа n присутствуют на равных. Поэтому хотя среднее число $\langle n\rangle_{\text{Pl}}$ для распределения Планка (12.131) действительно даётся уравнением (12.129) с температурой T, флуктуации этого числа

$$(\Delta n)^2 = \sum_n n^2 W_n^{\text{Pl}} - \langle n\rangle_{\text{Pl}}^2 = \langle n\rangle_{\text{Pl}}\Big(\langle n\rangle_{\text{Pl}} + 1\Big) \qquad (12.132)$$

меньше в два раза, чем для сжатого состояния (12.119).

Любой оператор, зависящий от координаты и импульса определенной колебательной моды или, что эквивалентно, от операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$, может быть записан в общем виде в терминах эрмитовых *квадратурных* операторов,

$$\hat{X}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{X}_- = -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \qquad (12.133)$$

которые удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{X}_+, \hat{X}_-] = i \qquad (12.134)$$

и соотношению неопределённости

$$(\Delta X_+)(\Delta X_-) \geqslant 1/2. \qquad (12.135)$$

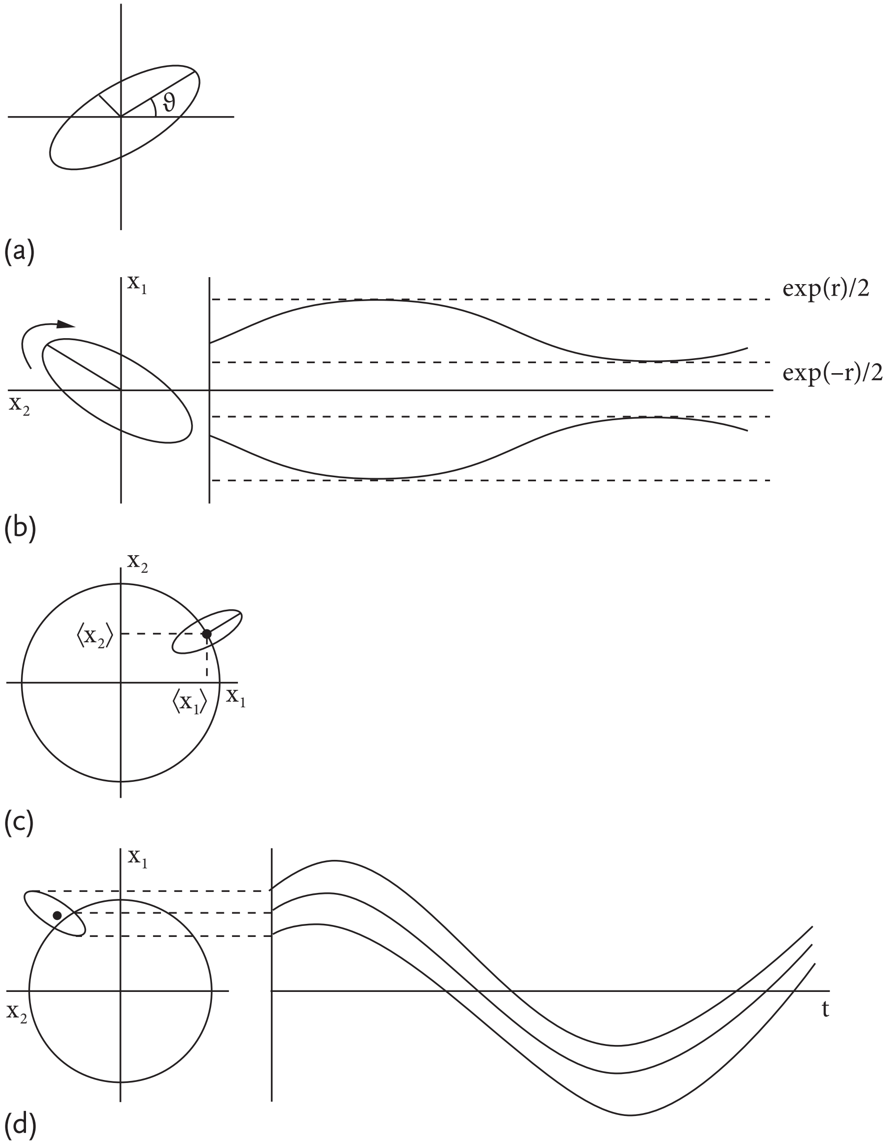

Рис. 12.1: Эллипс ошибок электрического поля (12.136) для чистого сжатого состояния, $\alpha = 0$ (рисунки *a* и *b*) и для общего сжатого состояния с $\alpha \neq 0$ (рисунки *c* и *d*)

В частности, как мы увидим при квантовании электромагнитного поля (раздел 28.3), компоненты поля становятся линейными комбинациями операторов рождения и уничтожения. Для моды с частотой ω в когерентном состоянии с временно́й зависимостью (12.61) амплитуда электрического поля может быть выражена как

$$\hat{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_0[\hat{X}_+ \cos(\omega t) + \hat{X}_- \sin(\omega t)]. \tag{12.136}$$

Когерентное состояние имеет минимальную неопределённость и равные дисперсии двух квадратурных компонент, смещённых на $\pi/2$ по фазе. В сжатом состоянии с периодическим минимумом неопределённости одна квадратура имеет уменьшенную дисперсию (см. например, уравнение (12.111)). Это можно увидеть во временно́й эволюции *эллипса ошибок*, который является результатом сжатия круга ошибок когерентного состояния. Рис. 12.1 показывает данное временно́е поведение (задача 12.20) среднего значения амплитуды электрического поля (12.136) и его дисперсии. Эллипс вращается вокруг своего центра, а центр вращения — вокруг начала координат, как в обычном когерентном состоянии. Уменьшение колебаний одной из квадратур в сжатом состоянии используется в современных экспериментах, которые требуют особой точности. Сжатые состояния могут быть получены по-разному средствами квантовой оптики, включая так называемое *параметрическое деление частоты* [58], когда в оптическом резонаторе фотоны с частотой 2ω преобразуются в коррелированые пары частотой ω.

Задача 12.20

Найти зависимость от времени $\langle \mathcal{E} \rangle$ и $(\Delta\mathcal{E})^2$ в общем сжатом состоянии $|\alpha; z = r\exp(i\vartheta)\rangle$.

Решение.

См. рис. 12.1. Среднее значение такое же, как в чистом когерентном состоянии,

$$\langle \alpha; z|\hat{\mathcal{E}}|\alpha; z\rangle = \langle \alpha; 0|\hat{\mathcal{E}}|\alpha; 0\rangle = \sqrt{2}\,\mathcal{E}_0\Big[\mathrm{Re}(\alpha)\cos(\omega t) + \mathrm{Im}(\alpha)\sin(\omega t)\Big]. \tag{12.137}$$

Среднеквадратичная флуктуация поля та же самая, как в чистом сжатом состоянии с $\alpha = 0$, и может быть выражена с помощью матричного умножения

$$(\Delta\mathcal{E})^2_{\alpha;z} = (\Delta\mathcal{E})^2_{0;z} = 2\mathcal{E}_0^2 \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \end{pmatrix} \sigma \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \end{pmatrix}, \tag{12.138}$$

где матрица сжатия имеет вид

$$\sigma = \frac{\cosh^2(r) + \sinh^2(r)}{4} + \frac{\cosh(r)\sinh(r)}{2} \begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ \sin\vartheta & -\cos\vartheta \end{pmatrix}. \quad (12.139)$$

Сжатие хорошо видно при $\vartheta = 0$, когда

$$\sigma = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} e^{2r} & 0 \\ 0 & e^{-2r} \end{pmatrix}. \quad (12.140)$$

Дополнительная литература: [58, 61–63].

Объяснять что-либо наличием особой «жизненной силы» столь же бессмысленно, как объяснять притяжение между магнитом и железом, просто называя его «магнетизмом».

Дж. М. Шлейден, «Основы научной ботаники»

Глава 13

Включение магнитного поля

13.1 Магнитное поле в классической механике

До сих пор мы рассматривали квантовые проблемы с потенциальными полями $U(\mathbf{r})$. Магнитные поля, в отличие от статических электрических полей, не могут быть включены таким образом. Вместо этого мы введём *принцип минимальности* включения электромагнитного взаимодействия, используемый в классической лагранжевой механике.

Для нерелятивистской заряженной частицы массой m и электрическим зарядом e электромагнитное поле включается посредством *функции Лагранжа* [12]

$$\mathcal{L}(\mathbf{r},\mathbf{v}) = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} - e\varphi(\mathbf{r}) + \frac{e}{c}\Big(\mathbf{A}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{v}\Big). \tag{13.1}$$

Электромагнитное поле определяется здесь через *потенциалы*, скалярный φ и векторный $\mathbf{A}$. С помощью функции Лагранжа (13.1) *канонический импульс* находится как

$$\mathbf{p} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}. \tag{13.2}$$

Этот импульс теперь не совпадает с *кинетическим импульсом*

$$m\mathbf{v} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A}. \tag{13.3}$$

Лагранжево уравнение движения имеет вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{r}}. \tag{13.4}$$

Для i-ой компоненты уравнения (13.3) получаем

$$m\,\frac{dv_i}{dt} = -\frac{e}{c}\,\frac{\partial A_i}{\partial t} - e\,\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} + \frac{e}{c}v_j\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right). \tag{13.5}$$

Теперь определим электрическое $\mathcal{E}$ и магнитное $\mathcal{B}$ поля через производные потенциалов

$$\mathcal{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\,\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \tag{13.6}$$

$$\mathcal{B} = \operatorname{curl}\mathbf{A} \equiv [\nabla\times\mathbf{A}]. \tag{13.7}$$

Последний член в (13.5) содержит $\varepsilon_{ijk}\mathcal{B}_k$ (как всегда, подразумевается суммирование по повторяющимся индексам), и уравнение движения принимает обычный вид с *силой Лоренца* в правой части,

$$m\,\frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\mathcal{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v}\times\mathcal{B}]. \tag{13.8}$$

Обычно отмечается, что уравнение движения содержит только *поля*, $\mathcal{E}$ и $\mathcal{B}$, так что *потенциалы*, φ и $\mathbf{A}$, можно рассматривать как вспомогательные величины, которые ненаблюдаемы. Это формулируется как принцип *калибровочной инвариантности* теории: можно перейти к другому набору потенциалов посредством *калибровочного преобразования*

$$\mathbf{A}\to\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \quad \varphi\to\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\,\frac{\partial f}{\partial t}, \tag{13.9}$$

где f — произвольная однозначная функция координат и времени. При этом поля, а следовательно, и уравнения движения инвариантны,

$$\mathcal{E}' = -\nabla\varphi' - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{c}}\,\frac{\partial\mathbf{A}'}{\partial\mathbf{t}} = \mathcal{E}, \quad \mathcal{B}' = \operatorname{curl}\mathbf{A}' = \mathcal{B}. \tag{13.10}$$

Задача 13.1

Показать, что статическое однородное магнитное поле $\mathcal{B}$ может, в частности, описываться следующими формами (калибровками) векторного потенциала: симметричная калибровка,

$$(a) \quad \mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathcal{B}\times\mathbf{r}], \tag{13.11}$$

а также калибровка, в которой поле фиксировано вдоль оси z,

$$(\textit{б})\quad \mathbf{A} = (-\mathcal{B}y, 0, 0), \tag{13.12}$$

или

$$(\textit{в})\quad \mathbf{A} = (0, \mathcal{B}x, 0). \tag{13.13}$$

Найти калибровочные функции f, которые осуществляют преобразования между этими вариантами.

Можно определить *функцию Гамильтона* в соответствии с правилами классической механики,

$$H = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{v} - \mathcal{L}, \tag{13.14}$$

с результатом

$$H = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} + e\varphi = \frac{\Big(\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}\Big)^2}{2m} + e\varphi. \tag{13.15}$$

Выражение функции Гамильтона через кинетический импульс (или скорость) и скалярный потенциал не изменилось в присутствии магнитного поля, но соотношение между кинетическим импульсом и каноническим импульсом теперь другое.

13.2 Квантовая формулировка и калибровочная инвариантность

Мы предполагаем, что в гамильтоновой формулировке квантовой механики мы можем по-прежнему использовать уравнение (13.15), в котором канонический импульс $\mathbf{p}$ и радиус-вектор $\mathbf{r}$ замещены соответствующими операторами с нормальным коммутационным соотношением (4.30). Как всегда, квантовая формулировка является более общей, чем классическая, и поэтому не может быть выведена из последней; рецепт квантования должен быть проверен экспериментом.

Таким образом, мы начинаем с квантового гамильтониана частицы в произвольном электромагнитном поле,

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - (e/c)\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})\right)^2}{2m} + e\varphi(\hat{\mathbf{r}}). \tag{13.16}$$

Эту процедуру неформально можно назвать «удлинением» импульса,

$$\hat{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\,\hat{\mathbf{A}}. \tag{13.17}$$

Этот же *принцип минимальности* включения электромагнитного взаимодействия будет применяться и к системам многих частиц; в присутствии электромагнитного поля каждый оператор импульса в гамильтониане должен быть изменён в соответствии с (13.17) путём добавления локального векторного потенциала. Тогда уравнения движения для операторов Гейзенберга могут быть получены в обычном порядке,

$$\frac{d}{dt}\,\hat{\mathbf{r}} \equiv \hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] = \frac{1}{m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right), \tag{13.18}$$

в соответствии с классическим определением (13.3). Поскольку канонический оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$ не коммутирует с координатами в аргументе векторного потенциала, компоненты оператора скорости (13.18) не коммутируют между собой,

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = -\frac{e}{m^2c}\Big([\hat{p}_i, \hat{A}_j] + [\hat{A}_i, \hat{p}_j]\Big). \tag{13.19}$$

Этот коммутатор прямо пропорционален магнитному полю,

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{ie\hbar}{m^2c}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) = \frac{ie\hbar}{m^2c}\,\varepsilon_{ijk}\mathcal{B}_k. \tag{13.20}$$

Две компоненты скорости, поперечные по отношению к направлению магнитного поля, не могут иметь одновременно определенные значения. Это следствие *циклотронного движения* частицы вокруг поля, которое изменяет характер траекторий в фазовом пространстве.

Калибровочная инвариантность в квантовой физике оказывается даже более важным элементом, чем в классической. В релятивистской теории этот принцип на самом деле определяет весь характер электромагнитных и других взаимодействий, осуществляемых путём обмена векторными про-

межуточными частицами [31]. В нерелятивистской теории это один из руководящих принципов. Однако по сравнению с (13.9) и (13.10) ситуация становится более сложной. Полная инвариантность имеет место, если уравнение Шредингера,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)^2\Psi + e\varphi\Psi, \tag{13.21}$$

инвариантно относительно преобразования потенциалов (13.9). Но это невозможно, если мы не изменим вместе с тем и волновую функцию $\Psi \Rightarrow \Psi'$. Новое уравнение имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}} - \frac{e}{c}\nabla f\right)^2\Psi' + \left(e\varphi - \frac{e}{c}\dot{f}\right)\Psi'. \tag{13.22}$$

Легко видеть, что уравнение (13.22) эквивалентно предыдущему (13.21), если волновая функция приобретает дополнительную нетривиальную фазу, $\Psi' = \Psi\exp(i\gamma)$. Тогда

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}} - \frac{e}{c}\nabla f\right)\Psi' = \left\{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)\Psi\right\}e^{i\gamma} - \frac{e}{c}(\nabla f)\Psi e^{i\gamma} - i\hbar(i\nabla\gamma)\Psi e^{i\gamma}, \tag{13.23}$$

так что при выборе

$$\gamma = \frac{e}{\hbar c}f \tag{13.24}$$

дополнительные слагаемые сокращаются и мы приходим к результату, эквивалентному удлинению импульса,

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}'\right)\Psi' = \left\{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)\Psi\right\}e^{i\gamma}. \tag{13.25}$$

То же самое происходит и при повторном использовании удлинения импульса. С выбором (13.24) дополнительные члены в части уравнения со скалярным потенциалом также сокращаются. Тогда мы можем сократить $\exp(i\gamma)$ везде и приходим к такому же уравнению, как и до калибровочного преобразования. Мы пришли к выводу, что калибровочное преобразование (13.9) работает и в квантовой теории, если его дополнить преобразованием волновой функции с фазой, пропорциональной калибровочной функции f,

$$\Psi \Rightarrow \Psi' = \Psi e^{(ie/\hbar c)f}. \tag{13.26}$$

Таким образом, калибровочное преобразование превращается в унитарное преобразование квантовых состояний, которое изменяет локально фазы волновых функций в соответствии с измененным определением внешних потенциалов.

Современная релятивистская квантовая теории поля на самом деле следует обратному направлению аргументации: инвариантность по отношению к локальным фазовым преобразованиям требует введения векторных калибровочных полей через переопределение кинетических членов (13.17). Как мы увидим позже, калибровочная инвариантность векторного поля имеет место, только если кванты поля *безмассовые*, как в случае фотонов.

Задача 13.2

Найдите выражение для тока вероятности в присутствии внешнего электромагнитного поля и проверьте калибровочную инвариантность уравнения непрерывности.

Решение.

Стандартные выкладки приводят к

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_d, \tag{13.27}$$

где $\mathbf{j}_0$ — это старое выражение (7.55) для тока в потенциальном поле, в то время как новое слагаемое, *диамагнитный ток* $\mathbf{j}_d$, содержит произведение векторного потенциала и плотности вероятности $\rho = |\Psi|^2$ нахождения частицы в данной точке,

$$\mathbf{j}_d(\mathbf{r}) = -\frac{e}{mc}|\Psi(\mathbf{r})|^2\mathbf{A}(\mathbf{r}). \tag{13.28}$$

Используя представление (7.61) для тока $\mathbf{j}_0$ через фазу волновой функции, мы видим, что как ρ, так и $\mathbf{j}$ инвариантны относительно калибровочных преобразований, поскольку изменение диамагнитного тока компенсируется изменением $\mathbf{j}_0$ из-за изменения фазы (13.26).

Заметим, что поле скоростей, определенное как $\mathbf{j}/\rho$, больше не является *безвихревым*; его ротор пропорционален магнитному полю,

$$\operatorname{curl}\frac{\mathbf{j}_d}{\rho} = -\frac{e}{mc}\operatorname{curl}\mathbf{A} = -\frac{e}{mc}\mathcal{B}. \tag{13.29}$$

Теорема Стокса даёт *циркуляцию* C поля скоростей по замкнутому контуру, охватывающему силовые линии магнитного поля,

$$C = \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v} = -\frac{e}{mc} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{e}{mc} \int \operatorname{curl} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \\ = -\frac{e}{mc} \int \mathcal{B} \cdot \mathbf{dS} = -\frac{\mathbf{e\Phi}}{\mathbf{mc}}, \tag{13.30}$$

где Φ — это магнитный поток через поверхность, натянутую на контур. Этот результат также *калибровочно-инвариантен*, так как градиент однозначной калибровочной функции f не даёт вклада в контурный интеграл (13.30).

13.3 Наблюдаемы ли электромагнитные потенциалы?

Мы уже видели в разделе 5.2 на примере электростатической задачи, что электромагнитные потенциалы играют в квантовой теории роль, отличную по сравнению с их классическими аналогами. Наблюдаемые эффекты потенциалов необходимы для того, чтобы результаты были совместимы с соотношениями неопределённостей (задача 5.2). Эти эффекты проявляются через изменение фазы волновой функции, что демонстрирует неклассический характер явления.

Эффекты векторного потенциала можно наблюдать через квантовую интерференцию в ситуации, когда изменения фазы волновой функции отличаются для различных частей волнового пакета. Одним из наиболее ярких проявлений этого рода является *эффект Ааронова-Бома* [64] (на самом деле предвиденный ещё раньше [65]), который вызвал поток противоречивых публикаций, но был полностью подтверждён экспериментом (см. обзорную книгу [66]).

Изменим стандартный эксперимент с двумя щелями, вставляя в область разделённых пучков длинный, перпендикулярный к плоскости рисунка соленоид (рис. 13.1). Магнитное поле полностью заключено внутри соленоида и несёт полный магнитный поток Φ. Снаружи соленоида, в области доступной для частиц, поле равно нулю. Все классические магнитные эффекты полностью исключены, так как для частицы вероятность попасть в область с ненулевым магнитным полем равна нулю. Однако внутреннее магнитное поле создаёт векторный потенциал $\mathbf{A}$ снаружи, даже если там $\mathcal{B} = \operatorname{curl} \mathbf{A} = \mathbf{0}$. Для любого замкнутого пути, один раз обходящего

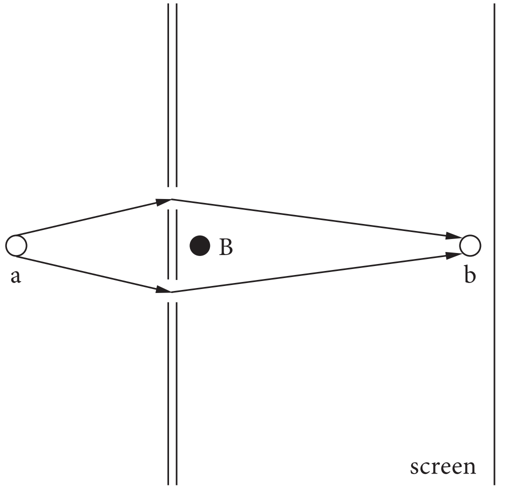

Рис. 13.1: Схематическая иллюстрация эффекта Ааронова-Бома: рассеяние вне соленоида с магнитным полем

соленоид,

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \Phi. \tag{13.31}$$

Так как во внешней области векторный потенциал $\mathbf{A}$ является безвихревым, мы можем попытаться представить $\mathbf{A}$ как градиент магнитного скалярного потенциала χ,

$$\mathbf{A} = -\nabla\chi. \tag{13.32}$$

Теперь мы можем устранить векторный потенциал (13.32) преобразованием (13.9) с $f = \chi$. Однако при этом появляется дополнительная фаза волновой функции (13.26). По любому пути ab приращение фазы φ волновой функции равно

$$\Delta_{ab}\varphi = \int_a^b \nabla\varphi \cdot d\mathbf{l} = \frac{e}{\hbar c}\int_a^b \nabla\chi \cdot d\mathbf{l} = -\frac{e}{\hbar c}\int_a^b \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}. \tag{13.33}$$

Это приращение не зависит от выбора пути между точками a и b, поскольку путь не проходит через соленоид с полем внутри. Сравнивая разности фаз

волн, проходящих через верхнюю и нижнюю щели, мы находим

$$\Delta\varphi = -\frac{e}{\hbar c}\left(\int_1 \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l} - \int_2 \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l}\right) = \frac{e}{\hbar c}\oint \mathbf{A}_{(2+1)}\cdot d\mathbf{l} = \frac{e\Phi}{\hbar c}. \qquad (13.34)$$

Эта разность фаз приводит к наблюдаемому сдвигу интерференционной картины, и величина этого сдвига определяется магнитным потоком через соленоид. Это происходит несмотря на то, что частицы не попадают в область магнитного поля.

На самом деле мы не устранили векторный потенциал полностью. Магнитный потенциал, который мы ввели в (13.32), в отличие от калибровочной функции, не есть *однозначная* функция, ее прирост подсчитывает, сколько раз наш контур наматывается вокруг соленоида. Математически мы должны говорить об изменении топологии, так как теперь волновые функции определены в *двусвязной* области вне соленоида. Калибровочная инвариантность по отношению к любой *однозначной* функции все ещё выполняется, так как такая функция даст исчезающий фазовый сдвиг (13.34). Следует отметить, что даже в случае соленоида с полем внутри сдвиг интерференционных полос может исчезнуть, если магнитный поток принимает такое значение, что $\Delta\varphi$ кратно 2π. Это соответствует магнитному потоку

$$\Phi = n\Phi_0, \qquad (13.35)$$

содержащему в точности целое число *n квантов магнитного потока*

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} = \frac{hc}{e} = 4.14\cdot 10^{-7}\,\text{Гс}\cdot\text{см}^2 = 4.14\cdot 10^{-15}\,\text{Вб} \qquad (13.36)$$

[Вебер] = [Тесла×метр^2]. Таким образом, мы видим, что в квантовой механике наблюдаемы эффекты электромагнитных потенциалов, а не только полей, но лишь через *калибровочно-инвариантные* характеристики, такие как фазовые интегралы.

13.4 Уровни Ландау: энергетический спектр

Квантовомеханическая задача движения заряженной частицы в статическом однородном магнитном поле, впервые решённая *Л. Д. Ландау* [67], имеет крайне важное значение для квантовой теории и многочисленных приложений. Напомним сначала классическое решение.

Направим ось z вдоль магнитного поля, $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$. Уравнение движения (13.8), которое можно записать в виде

$$\dot{\mathbf{v}} = [\omega \times \mathbf{v}], \tag{13.37}$$

описывает круговое движение частицы в плоскости, перпендикулярной к вектору угловой скорости,

$$\boldsymbol{\omega} = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{\mathcal{B}}, \tag{13.38}$$

и свободное движение вдоль направления поля, т. е. по оси z в нашей геометрии. Вращение происходит с *циклотронной частотой*

$$\omega_c = |\boldsymbol{\omega}| = \frac{|e|\mathcal{B}}{mc}. \tag{13.39}$$

Интегрируя (13.37) по времени, получаем

$$\mathbf{v} = [\boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)] + \mathbf{v}_0, \tag{13.40}$$

где мы предполагаем траекторию с центром в точке $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ и продольной скоростью $v_0 = v_z$. В координатах это решение имеет вид

$$v_x = \frac{e\mathcal{B}}{mc}(y - y_0), \quad v_y = -\frac{e\mathcal{B}}{mc}(x - x_0), \quad v_z = v_0. \tag{13.41}$$

Чтобы выразить это через канонический импульс (13.2), мы должны выбрать калибровку векторного потенциала. Например, при выборе (13.12) имеем

$$mv_x = p_x + \frac{e\mathcal{B}}{c}y, \quad mv_y = p_y, \quad mv_z = p_z \tag{13.42}$$

или, сравнивая с (13.41),

$$\frac{p_x}{m} + \frac{e\mathcal{B}}{mc}y = \frac{e\mathcal{B}}{mc}(y - y_0), \quad \frac{p_y}{m} = -\frac{e\mathcal{B}}{mc}(x - x_0), \tag{13.43}$$

где фиксированные координаты центра орбиты теперь могут быть связаны с текущими координатами и компонентами импульса,

$$x_0 = x + \frac{cp_y}{e\mathcal{B}}, \quad y_0 = -\frac{cp_x}{e\mathcal{B}}. \tag{13.44}$$

Следовательно, эти комбинации (13.44) являются *интегралами движения* в калибровке (13.12).

Переходя к квантовому описанию, мы имеем гамильтониан, который может быть записан либо в терминах канонического импульса (13.16), либо, что эквивалентно, через операторы скорости (13.15),

$$\hat{H} = \frac{m\hat{\mathbf{v}}^2}{2}. \tag{13.45}$$

Эта форма позволяет легко определить энергетический спектр. Действительно, продольная часть,

$$\hat{H}_z = \frac{m\hat{v}_z^2}{2} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \tag{13.46}$$

сама по себе определяет свободное движение вдоль поля с сохраняющимся импульсом p_z и *непрерывным* энергетическим спектром,

$$E_z = \frac{p_z^2}{2m}. \tag{13.47}$$

Поперечная часть,

$$H_\perp = \frac{m}{2}(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2), \tag{13.48}$$

содержит *некоммутирующие* операторы $\hat{v}_x$ и $\hat{v}_y$: согласно (13.20)

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{ie\hbar}{m^2c}\,\mathcal{B}. \tag{13.49}$$

Следуя [67], мы можем определить эффективную координату $\hat{Q}$ и эффективный импульс $\hat{P}$,

$$\hat{Q} = \frac{mc}{e\mathcal{B}}\,\hat{v}_x, \quad \hat{P} = m\hat{v}_y, \tag{13.50}$$

с каноническим коммутатором

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar. \tag{13.51}$$

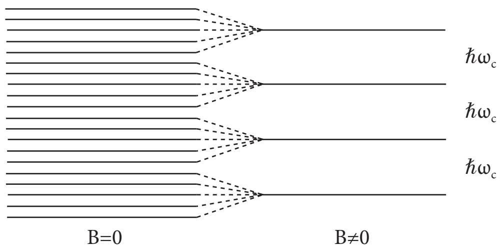

Рис. 13.2: Происхождение вырождения уровней Ландау

Поперечный гамильтониан тогда сводится к гамильтониану гармонического осциллятора,

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2\hat{Q}^2, \tag{13.52}$$

с циклотронной частотой (13.39). Энергетический спектр поперечного движения является *дискретным*,

$$E_\perp(n) = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{13.53}$$

и эти квантовые состояния называются *уровнями Ландау.*

13.5 Уровни Ландау: вырождение и волновые функции

Полный спектр, таким образом, определяется *двумя квантовыми числами*, дискретным n и непрерывным p_z. Но в отсутствие магнитного поля мы бы имели трёхмерный непрерывный спектр свободного движения с *тремя интегралами движения* $p_{x,y,z}$. Это означает (рис. 13.2), что состояния свободного движения в поперечной плоскости объединились в группы, соответствующие дискретным уровням Ландау. Собственные значения энергии (13.53) на самом деле *вырождены*.

Для того чтобы найти недостающее квантовое число, выберем явно конкретную калибровку, например (13.12), использованную ранее в классическом решении (13.42). Как и в (13.44), определим операторы $\hat{x}_0$ и $\hat{y}_0$, соответствующие центру орбиты.

Задача 13.3

Докажите, что операторы $\hat{x}_0$ и $\hat{y}_0$ являются квантовыми интегралами движения (коммутируют с гамильтонианом), но не коммутируют друг

с другом,

$$[\hat{y}_0, \hat{x}_0] = \frac{i\hbar c}{e\mathcal{B}}. \tag{13.54}$$

x- и y-координаты центра орбиты не могут иметь одновременно определенные значения. Только в пределе очень сильного магнитного поля $\mathcal{B}$ неопределённость, связанная с (13.54), пренебрежимо мала; в классическом случае это будет соответствовать исчезающе малому циклотронному радиусу. В качестве недостающего третьего квантового числа можно взять одну из координат центра циклотронной орбиты (этот выбор не является единственным, любая комбинация вырожденных состояний, которые принадлежат к данному уровню Ландау, снова является возможным стационарным состоянием). Это хорошо видно при непосредственном решении уравнения Шредингера для $\psi(x, y, z)$ в выбранной калибровке.

Используя гамильтониан (13.16) в магнитном поле (без электростатического потенциала, $\varphi = 0$), уравнение, которое надо решить, имеет вид

$$\frac{1}{2m}\left\{\left(\hat{p}_x + \frac{e\mathcal{B}}{c}\hat{y}\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right\}\psi = E\psi. \tag{13.55}$$

В этой калибровке x-координата циклическая, и сопряженный импульс p_x сохраняется. Разделение x и z переменных приводит к волновой функции в виде произведения

$$\psi(x, y, z) = e^{(i/\hbar)(p_z z + p_x x)} g(y), \tag{13.56}$$

где теперь p_z и p_x — собственные значения соответствующих сохраняющихся операторов, а $g(y)$ – собственная функция гармонического осциллятора. Мы видим, что в этой калибровке роль отсутствующего квантового числа играет p_x или y-координата центра орбиты,

$$y_0 = -\frac{cp_x}{e\mathcal{B}}. \tag{13.57}$$

Функция $g(y)$ удовлетворяет уравнению

$$\left\{\frac{1}{2m}\hat{p}_y^2 + \frac{1}{2}m\omega_c^2(y - y_0)^2\right\} g(y) = \left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right) g(y). \tag{13.58}$$

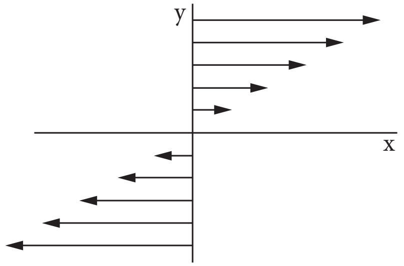

Рис. 13.3: Соответствие между y-положением центра орбиты и x-импульсом (при условии $e < 0$)

Подтверждаются спектр гармонического осциллятора с циклотронной частотой и интерпретация y_0 (выражение (13.57)) как y-координаты центра орбиты,

$$g_n(y) = \psi_n^{\text{harm. osc.}}(y - y_0). \tag{13.59}$$

Размер орбиты в y-направлении есть

$$|y - y_0| \sim \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|\mathcal{B}}} \approx 3 \cdot 10^{-4}\,\text{cm}/\sqrt{\mathcal{B}_{\text{Gs}}}. \tag{13.60}$$

Решение в выбранной калибровке соответствует фиксированному y_0 и равномерному движению (плоская волна) в x-направлении. Поскольку импульс p_x и координата y_0 взаимосвязаны через уравнение (13.57), то получаем пример описания общего циклотронного вращения (см. рис. 13.3). Теперь мы имеем три квантовых числа и энергетический спектр, который зависит от двух из них и не зависит от p_x или y_0,

$$E(n, p_x, p_z) = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m}. \tag{13.61}$$

Чтобы оценить степень вырождения уровней Ландау, предположим, как в разделе 3.8, что частица находится в большом ящике с размерами $L_{x,y,z}$, которые гораздо больше, чем размер орбиты (13.60). Число различных квантованных значений p_x в интервале Δp_x равно $L_x\Delta p_x/(2\pi\hbar)$. Однако полный интервал возможных значений p_x ограничен требованием, чтобы координата y_0 лежала внутри ящика, $0 < y_0 < L_y$. Согласно (13.57) это означает $0 < |(cp_x)/(e\mathcal{B})| < L_y$, т. е. интервал Δp_x допустимых значений квантового числа p_x составляет $|e|\mathcal{B}L_y/c$, а число возможных квантованных

значений p_x может быть оценено как

$$N_\perp = \frac{L_x}{2\pi\hbar}\,\frac{|e|\mathcal{B}L_y}{c} = \frac{|e|\mathcal{B}S}{2\pi\hbar c}, \tag{13.62}$$

где $S = L_xL_y$ — площадь поперечного движения. Принимая также во внимание интервал Δp_z продольного импульса, который квантуется с площадью фазового пространства $L_z\Delta p_z/(2\pi\hbar)$ на одно квантовое состояние, мы находим общее число вырожденных состояний в объёме V, соответствующих данному уровню Ландау и интервалу Δp_z (результат один и тот же для любого уровня n),

$$\Delta N = \frac{V}{(2\pi\hbar)^2}\,\frac{|e|\mathcal{B}}{c}\,\Delta p_z. \tag{13.63}$$

Степень вырождения растёт линейно с величиной магнитного поля. Следует отметить, что квантование поперечного движения (13.62) соответствует полному магнитному потоку через площадь, равному

$$\Phi = \mathcal{B}S = N_\perp\,\frac{2\pi\hbar c}{|e|} = N_\perp\Phi_0, \tag{13.64}$$

каждое состояние поперечного движения покрывает область, которая пронизана одним квантом (13.36) магнитного потока. Приведённая выше оценка хороша для достаточно большого объёма V, когда можно пренебречь вкладами от сравнительно небольшого числа траекторий, которые достигают границы объёма или локализованы вблизи поверхности. Однако подобные поверхностные состояния представляют особый интерес в некоторых приложениях.

Задача 13.4

Заряженная частица движется в присутствии статического однородного магнитного поля $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$ и статического однородного электрического поля $\mathcal{E} = \mathcal{E}_x$. Найти энергетический спектр и стационарные волновые функций частицы.

Решение.

Удобным выбором калибровки в этой геометрии является (13.13). Гамильтониан частицы принимает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)^2 - e(\mathcal{E}\cdot\hat{\mathbf{r}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_\mathbf{z}^2 + \hat{\mathbf{p}}_\mathbf{x}^2}{\mathbf{2m}} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2m}}\left(\hat{\mathbf{p}}_\mathbf{y} - \frac{\mathbf{e}}{\mathbf{c}}\mathcal{B}\hat{\mathbf{x}}\right)^\mathbf{2} - \mathbf{e}\mathcal{E}\hat{\mathbf{x}}. \tag{13.65}$$

В этой калибровке гамильтониан не содержит y- и z-координат, поэтому зависимость от этих координат может быть факторизована в виде плоских волн

$$\psi(x, y, z) = e^{(i/\hbar)(p_z z + p_y y)} g(x), \tag{13.66}$$

где p_z и p_y — собственные значения соответствующих компонент импульса, $\hat{p}_z$ и $\hat{p}_y$. Вводя x-координату центра *ларморовской окружности*,

$$x_0 = \frac{cp_y}{e\mathcal{B}}, \tag{13.67}$$

и циклотронную частоту (13.39), перепишем уравнение Шрёдингера для функции $g(x)$ в виде

$$\left\{\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_c^2 (x - x_0)^2 - e\mathcal{E}x\right\} g(x) = \left\{E - \frac{p_z^2}{2m}\right\} g(x). \tag{13.68}$$

Новый центр орбиты смещается под действием электрического поля,

$$\bar{x} = x_0 + \frac{e\mathcal{E}}{m\omega_c^2} = x_0 + \frac{mc^2}{e} \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}^2}. \tag{13.69}$$

Мы приходим к уравнению гармонического осциллятора:

$$\left\{\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_c^2 (x - \bar{x})^2\right\} g(x) = \left\{E - \frac{p_z^2}{2m} + e\mathcal{E}x_0 + \frac{mc^2}{2} \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}}\right)^2\right\} g(x). \tag{13.70}$$

Таким образом, полный набор собственных функций такой же, как для гармонического осциллятора в x-направлении с центром в точке $x = \bar{x}$, на который накладывается свободное движение вдоль осей z и y,

$$\psi_{np_yp_z} = e^{(i/\hbar)(p_y y + p_z z)} \psi_n^{\text{harm.osc.}}(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{e\mathcal{B}}{\hbar c}} (x - \bar{x}). \tag{13.71}$$

Для функции (13.71) собственное значение энергии равно

$$E(n, p_y, p_z) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} - e\mathcal{E}x_0 - \frac{mc^2}{2} \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}}\right)^2. \tag{13.72}$$

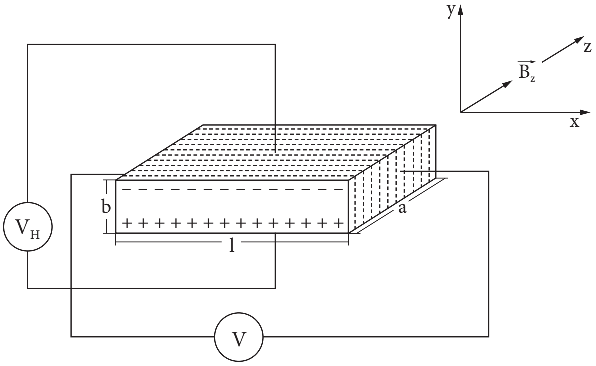

Рис. 13.4: Геометрия эффекта Холла

В отличие от случая чистого магнитного поля, $\mathcal{E} = 0$, здесь нет вырождения по p_y. Действительно, это число определяет x-координату центра орбит (13.67) и различные значения x_0 дают разные величины электростатической энергии в электрическом поле. Как видно из уравнения (13.71), типичный размер квантовых флуктуаций вокруг классической орбиты радиуса x_0 задаётся условием $\xi \sim 1$, т. е. $\Delta x \sim \sqrt{\hbar c/e\mathcal{B}}$, что может быть подавлено увеличением магнитного поля.

Наше нерелятивистское рассмотрение справедливо, только если $\mathcal{E} \ll \mathcal{B}$.

13.6 Квантовый эффект Холла

Когда в проводниках или полупроводниках с подвижными носителями заряда магнитное поле искривляет траекторию носителей, линейный ток приобретает поперечную компоненту, которая не может, однако, пересечь границу образца. Это приводит к накоплению заряда на границе, пока возникающее дополнительное напряжение (*напряжение Холла* V_H) не остановит поперечный ток.

Обычный *закон Ома*, т. е. пропорциональность плотности постоянного тока приложенному электрическому полю, $\boldsymbol{j} = \sigma\boldsymbol{\mathcal{E}}$, где σ есть проводимость образца, модифицируется в присутствии магнитного поля $\boldsymbol{\mathcal{B}}$. Для среды, которая была бы изотропной без магнитного поля, полярный вектор тока может быть сконструирован с использованием полярного вектора $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ и аксиального вектора $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ следующим образом:

$$\boldsymbol{j} = \sigma\boldsymbol{\mathcal{E}} + \sigma_m[\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}], \tag{13.73}$$

где появляется другая феноменологическая константа, σ_m, связанная с магнето-сопротивлением. Магнитное поле привносит эффективную анизотропию — электрическое поле с помощью силы Лоренца и результирующего искривления траектории частиц индуцирует ток в перпендикулярном направлении.

Задача 13.5

Вычислить параметры σ и σ_m в классической модели, где величина стационарного тока определяется силой трения (столкновениями в среде), пропорциональной скорости частицы.

Решение.

Уравнение движения заряда e с массой m имеет вид

$$m\dot{\mathbf{v}} + \gamma\mathbf{v} = e\mathcal{E} + \frac{\mathbf{e}}{\mathbf{c}}[\mathbf{v}\times\boldsymbol{\mathcal{B}}], \tag{13.74}$$

где $\gamma = m/\tau$ есть коэффициент трения, а τ — среднее время свободного пробега (обратная частота столкновений). Составляющая тока вдоль магнитного поля $j_z = nev_z$, где n — концентрация носителей, не зависит от магнитного поля,

$$j_z = \sigma_{zz}\mathcal{E}_z, \quad \sigma_{zz} = \frac{ne^2\tau}{m} \equiv \sigma_0. \tag{13.75}$$

Для «вращательных» компонент векторов в xy-плоскости, $v_+ = v_x + iv_y$ (см. (11.94)), находим с помощью циклотронной частоты $\omega_c = e\mathcal{B}/mc$

$$j_+ = nev_+ = \frac{ne^2}{\gamma - im\omega_c}\,\mathcal{E}_+ = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega_c\tau}\,\mathcal{E}_+. \tag{13.76}$$

Разделяя x- и y-компоненты, получаем двумерный тензор поперечной проводимости

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2}\begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau \\ \omega_c\tau & 1 \end{pmatrix}. \tag{13.77}$$

Симметрия этого тензора как функции магнитного поля, $\sigma_{ik}(\mathcal{B}) = \sigma_{ki}(-\mathcal{B})$, связана с тем, что при обращении времени магнитное поле меняет знак, а кинетические коэффициенты симметричны (*принцип Онзагера* [68]). Определение (13.73) даёт

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2}, \quad \sigma_m = -\frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2}\,\frac{\omega_c\tau}{\mathcal{B}}. \tag{13.78}$$

В практической схеме, когда проводник есть часть электрического контура и постоянный ток течёт вдоль оси x,

$$j_y = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \mathcal{E}_y = -\frac{\sigma_{yx}}{\sigma_{yy}}\,\mathcal{E}_x = -\omega_c\tau\mathcal{E}_x. \tag{13.79}$$

Это компенсирующее *поле Холла*, перпендикулярное к ведущему полю $\mathcal{E}_x$ и магнитному полю, связано с зарядами, накопленными на y-границе образца вследствие искривляющего действия магнитного поля (рис. 13.4). В этих условиях основной ток может быть записан в пропорциональной полю Холла форме

$$j_x = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2}\left(\frac{-\mathcal{E}_y}{\omega_c\tau} - \omega_c\tau\mathcal{E}_y\right) = -\frac{\sigma_0}{\omega_c\tau}\,\mathcal{E}_y. \tag{13.80}$$

Эффект Холла количественно обычно выражается в терминах *постоянной Холла* R_H, которая появляется из определений σ_0 (см. (13.75)) и ω_c,

$$j_x = nec\,\frac{\mathcal{E}_y}{\mathcal{B}} \equiv \frac{\mathcal{E}_y}{R_H\mathcal{B}}. \tag{13.81}$$

Эффективная скорость переноса в x-направлении есть классическая *скорость дрейфа*,

$$v_d = \frac{j_x}{ne} = c\,\frac{\mathcal{E}_y}{\mathcal{B}}, \tag{13.82}$$

какой она была бы [12] в скрещенных электрическом, $\mathcal{E}_y$, и магнитном, $\mathcal{B}_z$, полях. Прямое измерение постоянной Холла $R_H = \mathcal{E}_y/(\mathcal{B}j_x)$ позволяет определить концентрацию носителей заряда и их знак (электроны или дырки). Так как нормальная проводимость σ_0 может быть измерена независимо, знание концентрации n также предоставляет информацию о τ/m, где m может быть *эффективной массой*. Конечно, эта модель, в которой все электроны имеют одинаковую скорость, эффективную массу и частоту столкновений, является сильно упрощенной.

Новые квантовые эффекты были обнаружены при очень низких температурах, $T \sim 1°$K, и в сильных магнитных полях, $\mathcal{B} \sim 10$ Тл. В таких условиях кванты циклотронной частоты имеют энергию порядка $\hbar\omega_c \sim 10^{-3}$ эВ $\gg T$, так что тепловое движение не размазывает дискретную структуру уровней Ландау. *Квантовый эффект Холла* можно наблюдать в так называемом *инверсном слое* на границе раздела двух полупроводников, таких как GaAs

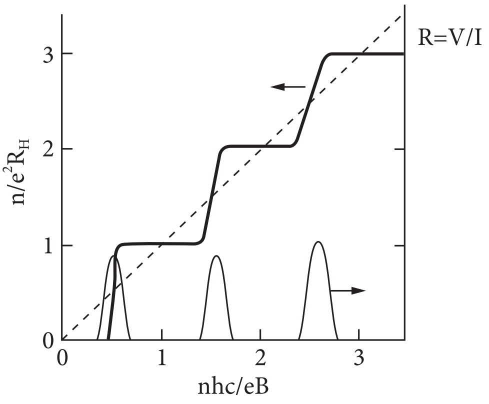

Рис. 13.5: Пример наблюдения квантового эффекта Холла [69]

и $Al_xGa_{1-x}As$, где можно достичь высокой чистоты и низкой частоты столкновений, $\omega_c\tau \gg 1$.

В терминах геометрических характеристик (рис. 13.4)

$$n = \frac{N}{Sa}, \quad S = bl, \quad I = j_x ab, \quad V_H = b\mathcal{E}_y, \tag{13.83}$$

где S — площадь поверхности образца, перпендикулярная магнитному полю, ток Холла равен

$$I = \frac{N}{S}\,\frac{ec}{\mathcal{B}}\,V_H. \tag{13.84}$$

Проводимость Холла является величиной, обратной сопротивлению,

$$G = \frac{I}{V_H} = \frac{Nec}{S\mathcal{B}}. \tag{13.85}$$

Экспериментаторы обычно приводят график зависимости hG/e^2, где h — постоянная Планка от величины

$$\nu = \frac{Nhc}{Se\mathcal{B}}. \tag{13.86}$$

В соответствии с формулой (13.85) ожидается, что эти величины должны быть равны друг другу. Вместо этого наблюдаются ступеньки (рис. 13.5) при целых значениях параметра ν — *целочисленный квантовый эффект Холла* [70].

Целочисленные значения ν соответствуют *точному заполнению* ν уровней Ландау. Действительно, из (13.62) следует, что

$$\nu = \frac{N}{N_{\perp}(\mathcal{B})}. \tag{13.87}$$

При таких значениях магнитного поля проводимость (13.85) *квантуется* в единицах e^2/h, согласно

$$G = \nu\,\frac{e^2}{h}, \tag{13.88}$$

независимо от геометрии. Этот метод обеспечивает одно из наиболее прецизионных измерений данной комбинации фундаментальных констант.

При точном целочисленном заполнении (13.87) продольное сопротивление исчезает, так как тогда можно построить без каких-либо затрат энергии делокализованную линейную комбинацию вырожденных заполненных уровней Ландау, которая соответствует плоской волне в x-направлении. В некотором смысле это пример *сверхпроводимости*. Продольное сопротивление заметно лишь при значениях магнитного поля в промежуточном режиме между факторами заполнения ν и $\nu + 1$. Более сложные явления, которые связаны с эффектами кулоновского взаимодействия между электронами наблюдаются [71] при малых *дробных* значениях фактора заполнения ν. Эти эффекты связаны с пространственной структурой локализованных волновых функций, соответствующих замкнутым электронным орбитам, которые отталкиваются друг от друга [72].

13.7 Произвольный закон дисперсии

С квазиклассическими аргументами мы можем расширить наше рассмотрение на более реалистичные ситуации, особенно в физике твердого тела, когда частицы, или любые объекты с общим названием *квазичастицы*, могут быть описаны с помощью закона дисперсии (зависимость их энергии $E(\mathbf{p})$ от импульса или *квазиимпульса* в кристалле, раздел 8.7), который может отличаться от $\mathbf{p}^2/2m$.

Начнем снова с *классического* движения квазичастицы в статическом однородном магнитном поле $\boldsymbol{\mathcal{B}}$. Для вывода уравнений движения будем рассматривать $E(\mathbf{p})$ как функцию Гамильтона и включим магнитное поле

минимальным образом через подстановку (13.17), так что

$$H = E\Big(\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}\Big). \tag{13.89}$$

Аргумент E можно назвать *кинетическим импульсом.* Уравнение Гамильтона имеет вид

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} \equiv \mathbf{v} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}^{\text{kin}}}. \tag{13.90}$$

Для *канонического импульса* $\mathbf{p}$ получаем

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{\partial E}{\partial p_j^{\text{kin}}}\left(-\frac{e}{c}\right)\frac{\partial A_j}{\partial x_i} \tag{13.91}$$

или, используя (13.90),

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}]_i + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial x_j}v_j. \tag{13.92}$$

В терминах кинетического импульса мы приходим к

$$\frac{d\mathbf{p}^{\text{kin}}}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} - \frac{e}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_j}v_j = \frac{e}{c}\,[\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}]. \tag{13.93}$$

Таким образом, сила Лоренца имеет обычную форму и только связь между скоростью $\mathbf{v}$ и кинетическим импульсом (13.90) является в общем случае более сложной, чем в уравнении (13.3).

Конечно, энергия по-прежнему сохраняется,

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}^{\text{kin}}} \cdot \frac{d\mathbf{p}^{\text{kin}}}{dt} = 0, \tag{13.94}$$

так как сила Лоренца перпендикулярна скорости. Вторым интегралом движения, как и ранее, является проекция p_z^{kin} на направление магнитного поля. Мы видим, что движение в пространстве импульсов идёт по траектории, которая лежит на пересечении поверхности энергии $E(\mathbf{p}^{\text{kin}}) = \text{const}$ с плоскостью $(\mathbf{p}^{\text{kin}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}) = \text{const}$. Уравнение (13.93) также показывает, что небольшие поперечные смещения импульса и координаты взаимосвязаны,

$$d\mathbf{p}^{\text{kin}} = \frac{e}{c}\,[d\mathbf{r} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}]. \tag{13.95}$$

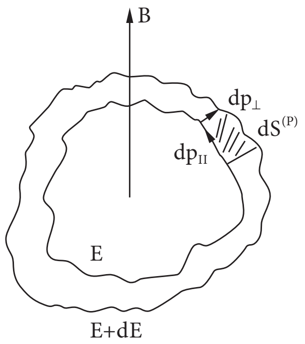

Рис. 13.6: Определение циклотронной частоты для замкнутых траекторий с произвольным законом дисперсии

Будучи подобными друг другу, они отличаются поворотом на угол $\pi/2$ в поперечной плоскости и масштабным коэффициентом $e\mathcal{B}/c$.

В отличие от обычного случая с изотропным спектром $E = \mathbf{p}^2/2m$ траектория частицы с произвольным законом дисперсии не обязательно замкнута. Тем не менее по замкнутым орбитам движение периодическое и мы можем вычислить его частоту, аналог (13.39). Рассмотрим поперечную плоскость (xy) в пространстве импульсов и две близкие замкнутые орбиты в этой плоскости (рис. 13.6). Орбиты лежат на поверхностях энергии для энергий E и $E+dE$. Для тангенциальной компоненты импульса в плоскости орбиты, $p_{||}$, получаем из (13.93) (здесь мы имеем дело исключительно с $\mathbf{p}^{\mathrm{kin}}$ и опускаем индекс «kin»)

$$\frac{dp_{||}}{dt} = \frac{e}{c} v_\perp \mathcal{B} = \frac{e}{c} \frac{dE}{dp_\perp} \mathcal{B}, \tag{13.96}$$

где $p_\perp$ и $v_\perp$ являются компонентами импульса и скорости, соответственно, перпендикулярными к траектории в плоскости (xy). Из уравнения (13.96) находим:

$$dt = \frac{dp_{||} dp_\perp}{dE} \frac{c}{e\mathcal{B}}, \tag{13.97}$$

так что период движения даётся формулой

$$T = \frac{c}{e\mathcal{B}} \frac{\oint dp_{||} dp_\perp}{dE} = \frac{c}{e\mathcal{B}} \frac{dS^{(p)}}{dE}, \tag{13.98}$$

где $dS^{(p)}$ является площадью кольца в импульсном пространстве между двумя орбитами, разделёнными энергией dE. Таким образом, частота

обращения по замкнутой орбите,

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi e\mathcal{B}}{c}\left(\frac{dS^{(p)}}{dE}\right)^{-1}, \tag{13.99}$$

пропорциональна полю $\mathcal{B}$ и выражается через характеристики энергетического спектра. В случае $E = \mathbf{p}^2/2m$ орбиты являются окружностями с площадью

$$S^{(p)} = \pi(p^2 - p_z^2) = 2\pi m\left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right), \tag{13.100}$$

тогда $dS^{(p)}/dE = 2\pi m$ и частота (13.99) совпадает с обычным выражением (13.39).

В соответствующей *квантовой* задаче мы не можем прийти к точному решению для произвольного закона дисперсии. Но мы можем получить общий рецепт *квазиклассического квантования*. Аналогично уравнению (13.20) находим коммутатор операторов компонент кинетического импульса,

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = \frac{ie\hbar}{c}\,\varepsilon_{ijk}\mathcal{B}_k. \tag{13.101}$$

Принимая $E(\hat{\mathbf{p}})$ в качестве квантового гамильтониана $\hat{H}$ для частицы в магнитном поле, мы получаем с помощью (13.101) операторные уравнения движения

$$i\hbar\,\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = [\hat{\mathbf{r}}, E(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar\,\frac{\partial E}{\partial\hat{\mathbf{p}}}, \tag{13.102}$$

$$i\hbar\,\frac{d\hat{p}_i}{dt} = [\hat{p}_i, E(\hat{\mathbf{p}})] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j]\,\frac{\partial E}{\partial\hat{p}_j} = \frac{ie\hbar}{c}\,\varepsilon_{ijk}\hat{v}_j\mathcal{B}_k. \tag{13.103}$$

Эти уравнения совпадают по форме с классическими уравнениями (13.92) и (13.93) и, следовательно, обладают теми же интегралами движения E и $(\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathcal{B})$.

Для поперечных компонент кинетического импульса коммутатор (13.101) даёт

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \frac{ie\hbar}{c}\,\mathcal{B}. \tag{13.104}$$

Переменными Ландау (13.50) в этом случае являются

$$\hat{Q} = \frac{c\hat{p}_x}{eB}, \quad \hat{P} = \hat{p}_y \tag{13.105}$$

с каноническим коммутатором (13.51). Теперь мы можем применить квазиклассическое правило квантования Бора-Зоммерфельда (1.17) для периодического движения по замкнутой орбите в поперечной плоскости. Это приводит к отбору стационарных квантовых состояний в виде

$$\oint P\,dQ = 2\pi\hbar(n+\gamma), \tag{13.106}$$

где n — целое число, а γ — фаза, которая, как правило, равна $1/2$, как и в случае гармонического осциллятора, и определяется точными граничными условиями (см. главу 15). Точное значение γ не имеет значения для наших целей. В импульсных переменных условие квантования (13.106) имеет вид

$$\oint p_y\,dp_x = 2\pi\hbar\,\frac{eB}{c}\,(n+\gamma). \tag{13.107}$$

Но левая сторона уравнения (13.107) есть не что иное, как площадь импульсного пространства, $S^{(p)}$, заключённая внутри классической орбиты с данной энергией. В наших классических решениях (уравнения (13.95)–(13.100)) мы встретились именно с этой величиной. Следует вывод, что для произвольного закона дисперсии квантуется *площадь замкнутой орбиты* в пространстве импульсов,

$$S^{(p)} = 2\pi\hbar\,\frac{eB}{c}\,(n+\gamma). \tag{13.108}$$

Для $\varepsilon = \mathbf{p}^2/2m$ и $\gamma = 1/2$ это совпадает с результатом Ландау (13.53). Как следствие масштабного соответствия (13.95) между орбитами в импульсном и координатном пространствах, площадь $S^{(r)}$ замкнутой траектории в пространстве координат оказывается также квантованной,

$$S^{(r)} = \left(\frac{c}{e\mathcal{B}}\right)^2 S^{(p)} = 2\pi\hbar\,\frac{c}{e\mathcal{B}}\,(n+\gamma). \tag{13.109}$$

Как и ранее (уравнение (13.64)), при переходе с одной замкнутой орбиты на следующую магнитный поток $\Phi = \int d\mathbf{S}^{(r)} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}$ возрастает на один квант,

$$\Delta\Phi = \mathcal{B}\,\frac{dS^{(r)}}{dn} = \frac{2\pi\hbar c}{e} = \Phi_0. \tag{13.110}$$

Задача 13.6

Показать, что степень вырождения квантованной орбиты определяется формулой (13.63) независимо от закона дисперсии.

Решение.

Число состояний на одну орбиту Ландау и интервал Δp_z продольного импульса равны

$$\Delta N = \frac{dS^{(p)}}{dn}\,\frac{\Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{13.111}$$

13.8 Симметричная калибровка

Среди различных возможных вариантов для векторного потенциала статического однородного магнитного поля выделяется симметричный выбор (13.11), поскольку он не разрушает симметрию задачи. При таком выборе осевая симметрия магнитного поля относительно оси z сохраняется и орбитальный момент ℓ_z является интегралом движения.

Как всегда, в задачах с угловым моментом удобно ввести повышающие и понижающие комбинации векторов (13.76). В данном случае мы будем использовать эти комбинации для радиус-вектора $\mathbf{r}$ и для вектора канонического импульса (т. е. для $\mathbf{p}$, а не для кинетического импульса $m\mathbf{v}$)),

$$x_{\pm} = x \pm iy, \quad p_{\pm} = p_x \pm ip_y. \tag{13.112}$$

Тогда компонента орбитального момента вдоль оси симметрии поля выражается как

$$\hat{\ell}_z = \frac{1}{\hbar}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \frac{i}{2\hbar}(\hat{x}_+\hat{p}_- - \hat{x}_-\hat{p}_+). \tag{13.113}$$

Задача 13.7

а) Показать, что операторы

$$\hat{X}_\pm = \frac{1}{2}\,\hat{x}_\pm \pm \frac{i}{m\omega_c}\,\hat{p}_\pm, \quad \hat{P}_\pm = \hat{p}_\pm \pm \frac{im\omega_c}{2}\,\hat{x}_\pm \tag{13.114}$$

разделяются на пары с коммутаторами

$$[\hat{X}_+, \hat{X}_-] = \frac{2\hbar}{m\omega_c}, \quad [\hat{P}_-, \hat{P}_+] = 2\hbar m\omega_c \tag{13.115}$$

и что операторы $\hat{X}_\pm$ коммутируют с операторами $\hat{P}_\pm$.

б) Предположим для определённости, что заряд $e < 0$ и $\omega_c = -e\mathcal{B}/mc$. Показать, что

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_c}}\,\hat{P}_-, \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_c}}\,\hat{P}_+ \tag{13.116}$$

и

$$\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}}\,\hat{X}_+, \quad \hat{b}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}}\,\hat{X}_- \tag{13.117}$$

являются двумя парами независимых операторов рождения и уничтожения с алгеброй (11.133) для каждой пары. (В случае $e > 0$ нужно поменять местами $\hat{P}_-$ и $\hat{P}_+$, а также $\hat{X}_-$ и $\hat{X}_+$, в согласии с обратным направлением вращения.)

в) Доказать, что операторы (13.116) и (13.117) диагонализируют одновременно и гамильтониан поперечного движения (13.48), и орбитальный момент (13.113),

$$\hat{H}_\perp = \hbar\omega_c\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \tag{13.118}$$

$$\hat{\ell}_z = \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b}. \tag{13.119}$$

Стационарные уровни Ландау характеризуются здесь двумя квантовыми числами осциллятора n_a и n_b, так что энергетический спектр принимает вид $E_n = \hbar\omega_c(n+1/2)$, $n = n_a$, и орбитальный момент $\ell_z = n - n_b$ маркирует вырожденные по энергии состояния. Квантовое число $\ell = \ell_z$ принимает целые значения от $\ell = -\infty$ до $\ell = n$.

Задача 13.8

Решить уравнение Шредингера и найти координатные волновые функции стационарных состояний с использованием симметричной калибровки (13.11).

13.9 Когерентные состояния в магнитном поле

После того как проблема движения в магнитном поле была сведена к системе двух независимых гармонических осцилляторов, можно построить когерентные состояния с использованием стандартного метода гл. 12 [73]. Собственные состояния $|\alpha, \beta\rangle$ двух коммутирующих операторов уничтожения $\hat{a}$ и $\hat{b}$ могут быть помечены двумя соответствующими комплексными квантовыми числами α и β. Удобно придать им размерность длины таким образом, что

$$\hat{X}_+|\alpha, \beta\rangle = \beta|\alpha, \beta\rangle, \quad \hat{P}_-|\alpha, \beta\rangle = -i\hbar\,\frac{\alpha}{R^2}|\alpha, \beta\rangle. \tag{13.120}$$

Здесь $R = \sqrt{\hbar/m\omega_c}$ — радиус самой нижней орбиты Ландау (13.60).

Используя определения (13.116) и (13.117) для осцилляторных операторов $\hat{a}$ и $\hat{b}$, порождающих когерентные состояния (13.120), мы находим, как и в задаче 12.1, разложение когерентных состояний в терминах уровней Ландау $|n; \ell\rangle$ в симметричной калибровке:

$$|\alpha, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=-\infty}^{n} C_{n\ell}(\alpha, \beta)|n; \ell\rangle. \tag{13.121}$$

Коэффициенты разложения можно легко найти (сравните с (12.7)), и они имеют вид

$$C_{n\ell}(\alpha, \beta) = e^{-(|\alpha|^2+|\beta|^2)/4R^2}\,\frac{(-i\alpha)^n \beta^{n-\ell}}{(2R^2)^{n-\ell/2}\sqrt{n!(n-\ell)!}}. \tag{13.122}$$

Аналогично (11.132) выразим когерентные состояния в терминах лестницы, построенной на базе основного состояния $|0; 0\rangle \equiv |n = 0, \ell = 0\rangle$,

$$|\alpha, \beta\rangle = e^{-(|\alpha|^2+|\beta|^2)/4R^2}\, e^{(-i\alpha/2\hbar)\hat{P}_+ + (\beta/2R^2)\hat{X}_-}|0; 0\rangle. \tag{13.123}$$

Несколько следующих задач устанавливают основные свойства когерентных состояний в магнитном поле, показывая их близкое родство с классическим случаем.

Задача 13.9

Найти временную эволюцию когерентного состояния $|\alpha, \beta\rangle$.

Решение.

Состояние остается когерентным, по аналогии с (12.38)

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i(\omega_c/2)t}|\alpha, \beta e^{-i\omega_c t}\rangle. \tag{13.124}$$

Комплексная величина β равномерно вращается с циклотронной частотой, в то время как α остаётся фиксированной (аналог циклотронного вращения с определённой орбитальной скоростью вокруг данного центра).

Задача 13.10

Найти средние значения координат x, y и компонент импульса p_x, p_y частицы в когерентном состоянии $|\alpha, \beta\rangle$.

Решение.

Результат соответствует картине, в которой α имеет смысл неподвижного центра траектории в фазовом пространстве, в то время как β представляет собой бегущую переменную циклотронной орбиты

$$\langle \hat{x}(t)\rangle = \mathrm{Re}\Big(\alpha + \beta e^{-i\omega_c t}\Big), \quad \langle \hat{y}(t)\rangle = \mathrm{Im}\Big(\alpha - \beta e^{-i\omega_c t}\Big), \tag{13.125}$$

$$\langle \hat{p}_x(t)\rangle = \frac{\hbar}{2R^2}\,\mathrm{Im}\Big(\alpha+\beta e^{-i\omega_c t}\Big), \quad \langle \hat{p}_y(t)\rangle = -\frac{\hbar}{2R^2}\,\mathrm{Re}\Big(\alpha-\beta e^{-i\omega_c t}\Big). \tag{13.126}$$

Задача 13.11

Найти координатную волновую функцию когерентного состояния.

Решение.

Результатом является гауссов волновой пакет в переменных $x_\pm$, смещенный в комплексную плоскость,

$$\langle x, y|\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi R^2}} e^{-(1/4R^2)[(x_+-2\beta)(x_--2\alpha)+|\alpha|^2+|\beta|^2-2\alpha\beta]}. \tag{13.127}$$

Для центрального состояния, $\alpha = \beta = 0$, которое является в то же время и основным состоянием $n = \ell = 0$, имеем простой двумерный гауссов волновой пакет,

$$\langle x, y|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi R^2}} e^{-(x^2+y^2)/4R^2}. \tag{13.128}$$

Задача 13.12

Доказать, что когерентные состояния минимизируют соотношение неопределённостей для обеих переменных, x и y,

$$(\Delta x) \cdot (\Delta p_x) = (\Delta y) \cdot (\Delta p_y) = \frac{\hbar}{2}. \tag{13.129}$$

Задача 13.13

Показать, что разложением единицы, по аналогии с (11.33), здесь является соотношение

$$\int \frac{d^2\alpha\, d^2\beta}{4\pi^2 R^2} \,|\alpha, \beta\rangle\langle\alpha, \beta| = \hat{1}. \tag{13.130}$$

Дополнительная литература: [64–66, 69, 74–77].

Столетие спустя после открытия Планка
стало совершенно ясно, что квантовая
теория лежит в основе понимания
естественных явлений как на микро-, так и
на макроскопических масштабах.
*Дж. Съюэлл, «Квантовая механика и
возникающая из нее макрофизика»*

Глава 14

Макроскопическая квантовая когерентность

14.1 Идея макроскопической когерентности

В системе многих тел волновая функция в координатном представлении зависит от всех координат частиц $\mathbf{r}_a,\ a = 1, ..., N$. Гамильтониан взаимодействующих нерелятивистских частиц с массами m_a и зарядами e_a во внешнем электромагнитном поле, заданном электромагнитными потенциалами φ и $\mathbf{A}$, можно записать в виде

$$\hat{H} = \sum_a \frac{\left(\hat{\mathbf{p}}_a - (e_a/c)\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}_a)\right)^2}{2m_a} + \sum_a e_a\varphi(\hat{\mathbf{r}}_a) + \frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\hat{U}_{ab}, \qquad (14.1)$$

где потенциалы $\hat{U}_{ab}$ описывают парные взаимодействия частиц. Тем не менее при некоторых обстоятельствах можно описать определённый класс явлений, полагая, что вся макроскопическая система находится во вполне определённом квантовом состоянии. Это происходит, когда система обладает *дальним порядком* [78] и важными примерами являются *сверхтекучесть* и *сверхпроводимость*.

В макроскопической системе можно рассмотреть *физически малый* элемент объёма ΔV, который в среднем содержит большое количество частиц $N \gg 1$. Ограничимся рассмотрением тех явлений, когда для всех процессов на макроскопических масштабах характерно плавное изменение в пространстве и времени. Тогда размер элемента объёма, даже для $N \gg 1$, всё ещё может быть мал по сравнению с масштабом заметного изменения макроскопических величин. Поэтому для макроскопических процессов весь элемент можно характеризовать координатой центра $\mathbf{R}$ и общим моментом времени t, а последствиями запаздывания и разности фаз между разными частями одного и того же элемента пренебречь. Это описание является

неполным и может применяться для плавных *гидродинамических* процессов; возбуждения одной или небольшого числа частиц внутри элемента объёма не могут быть описаны таким образом.

До этого момента мы использовали квазиклассические понятия и не вводили квантовую когерентность. Переходя к квантовой механике, мы можем попытаться определить макроскопический вектор состояния $|\Phi(\mathbf{R}, t)\rangle$, в котором вместо N отдельных координат используется только их центроид $\mathbf{R}$. Число частиц в объёме ΔV не может быть точно фиксированным, оно колеблется вокруг среднего значения $\overline{N}$ за счёт обмена с соседними элементами объёма. Однако при достаточно большом ΔV поверхностные эффекты играют второстепенную роль по сравнению с объёмными. Тогда флуктуации ΔN из-за потока частиц через поверхность относительно невелики, и можно считать $1 \ll \Delta N \ll \overline{N}$. Хотя вектор состояния $|\Phi\rangle$ является суперпозицией состояний $|N\rangle$ с различными числами частиц, относительный разброс все еще мал, $\Delta N/\overline{N} \ll 1$. Эта ситуация уже обсуждалась в разделе 12.6, и было показано, что адекватное описание даётся *когерентным состоянием*, которое может быть суперпозицией состояний с различными числами квантов, но с небольшим относительным разбросом.

Кроме того, и это главное, что отличает обычную гидродинамическую ситуацию от макроскопической квантовой когерентности, усреднение некоторых величин по объёму, размер которого гораздо больше, чем расстояния между частицами, должно давать ненулевой результат. Для того чтобы формализовать эту идею, введём операторы $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}$ рождения и уничтожения *частиц* аналогично тому, как это делалось для квантов гармонического осциллятора. Детали формализма будут обсуждаться гораздо позже (гл. III.11), но здесь мы будем просто считать, что такие операторы существуют для любой точки $\mathbf{r}$ и оператор полного числа частиц внутри ΔV определяется интегралом от *оператора плотности* (сравните с (11.110))

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{a}^\dagger(\mathbf{r})\hat{a}(\mathbf{r}), \tag{14.2}$$

по этому объёму,

$$\hat{N} = \int_{\Delta V} d^3r\, \hat{n}(\mathbf{r}). \tag{14.3}$$

Если состояние $|\Phi\rangle$ подобно когерентному состоянию, то должно существовать среднее значение $\langle\Phi|\hat{a}(\mathbf{r})|\Phi\rangle$, как для исходного когерентного состояния (12.4). Нас интересует только свойство *макроскопической когерентности*, когда это среднее значение не исчезает после усреднения по

элементу объёма. Такую *дважды усреднённую* величину можно назвать макроскопической волновой функцией.

14.2 Макроскопическая волновая функция [1, 2]

Эта функция,

$$\Psi(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V(\mathbf{R})} d^3r \, \langle \Phi | \hat{a}(\mathbf{r}) | \Phi \rangle, \tag{14.4}$$

зависит от координаты $\mathbf{R}$ центра объёма и от времени. Среднее по объёму стремится к нулю для *нормальной* системы, как только размер объёма превышает межчастичное расстояние. Ненулевое среднее значение выживает, если система является *сверхтекучей* (*сверхпроводящей*), когда квантовые корреляции внутри объёма синхронизируют движения отдельных частиц.

Как вводилось выше, вектор состояния является суперпозицией

$$|\Phi\rangle = \sum_N C_N |N\rangle \tag{14.5}$$

состояний с определённым числом частиц. Поскольку оператор аннигиляции переводит N в $N-1$, среднее значение (14.4) есть

$$\Psi(\mathbf{R}, t) = \sum_N C^*_{N-1} C_N \, \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V(\mathbf{R})} d^3r \, \langle N-1 | \hat{a}(\mathbf{r}) | N \rangle. \tag{14.6}$$

Внутренняя когерентность может существовать, если фазы амплитуд C_N *не являются случайными*. Потребуем *фазовую синхронизацию*,

$$C_N = \sqrt{\rho_N} \, e^{iN\varphi}, \tag{14.7}$$

как в обычном когерентном состоянии (раздел 12.1). Здесь весовые множители ρ_N имеют заметную величину только внутри типичного флуктуационного интервала $\Delta N \ll \bar{N}$ и их значения почти не меняются в пределах этого интервала. В таком случае

$$\Psi(\mathbf{R}, t) = \overline{\langle \hat{a} \rangle} \, e^{i\varphi}, \tag{14.8}$$

где матричный элемент $\langle N-1 | \hat{a}(\mathbf{r}) | N \rangle$ дополнительно усредняется по волновому пакету с вероятностями $\sqrt{\rho_{N-1}\rho_N} \approx \rho_N$ и по положениям радиус-вектора $\mathbf{r}$ внутри ΔV.

Согласно определениям (14.2) и (14.3) максимально возможное значение $\langle\hat{a}(\mathbf{r})\rangle$, равное $\sqrt{n} = (\overline{N}/\Delta V)^{1/2}$, может быть достигнуто в пространственно однородном случае, когда все частицы находятся в одном квантовом состоянии (*конденсат Бозе — Эйнштейна*). В нормальной (несверхтекучей) системе усредненный матричный элемент мал, но в сверхтекучих системах, таких как жидкий гелий-4, дальний порядок приводит к

$$\langle\hat{a}(\mathbf{r})\rangle \sim \sqrt{n_s}, \quad n_s = \frac{N_s}{\Delta V}, \tag{14.9}$$

где n_s является *сверхтекучей плотностью* [1] и N_s есть макроскопическое число того же порядка, что и общее среднее число частиц $\overline{N}$. На самом деле, это может служить определением *недиагонального дальнего порядка*. Аналогичная ситуация имеет место в сверхпроводниках, где роль частиц играют коррелированные *электронные пары* (гл. III.16). Вводя сверхтекучую плотность, запишем макроскопическую волновую функцию (14.6) в виде, подобном гидродинамической форме (7.60) одночастичного уравнения Шредингера,

$$\Psi(\mathbf{R},t) = \sqrt{n_s(\mathbf{R},t)}\; e^{i\varphi(\mathbf{R},t)}, \tag{14.10}$$

т. е. в терминах двух вещественных функций, плотности $n_s(\mathbf{R},t)$ и фазы $\varphi(\mathbf{R},t)$.

14.3 Гидродинамическое описание

Ситуация со многими частицами и плавно меняющимися макроскопическими свойствами является квазиклассической. Мы можем применить квазиклассическую динамику (12.62)–(12.64), сформулированную исключительно в терминах числа частиц и фазы волновой функции. Если $E = \langle H\rangle$ — средняя энергия элемента объёма, то её изменение после добавления дополнительной частицы есть *химический потенциал*,

$$\frac{\partial E}{\partial N} = \mu. \tag{14.11}$$

Динамические уравнения для когерентного состояния были выведены в задаче 12.9 без прямой ссылки на конкретный вид гамильтониана. Поэтому фаза $\varphi(\mathbf{R},t)$ меняется во времени в соответствии с

$$\hbar\dot{\varphi} = -\frac{\partial E}{\partial N} = -\mu. \tag{14.12}$$

Это рассмотрение можно также распространить на случай теплового равновесия с ненулевой температурой, когда $\partial E/\partial N$ должно быть изменено на $\partial F/\partial N$, где F — *свободная энергия*; при этом фаза макроскопической волновой функции становится *термодинамической переменной.*

Полному равновесию соответствует $\mu = \mathrm{const}$, когда фаза не зависит от координаты и волновая функция (14.10) гармонически осциллирует во всём пространстве с частотой $\mu/\hbar$. Это справедливо даже в присутствии внешних полей, когда обе величины E и μ содержат дополнительные вклады, но равновесие по-прежнему соответствует постоянному химическому потенциалу. Распространяя рассмотрение на случай *локального* равновесия, когда макроскопические величины плавно меняются в пространстве и времени и $\mu = \mu(\mathbf{R}, t)$, получим из уравнения (14.12)

$$\hbar \frac{d\boldsymbol{\nabla}\varphi}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}\mu \equiv \mathbf{f}, \tag{14.13}$$

градиент химического потенциала определяет переменную силу $\mathbf{f}$, действующую на частицу. Сила обращается в нуль в условиях равновесия.

Теперь фаза макроскопической волновой функции становится механической переменной. Наличие силы должно привести к изменению $d\mathbf{p}_s/dt$ среднего локального импульса сверхтекучего движения, приходящегося на одну частицу, $\mathbf{p}_s = m\mathbf{v}_s$. Это приводит к идентификации сверхтекучей скорости $\mathbf{v}_s$ с градиентом фазы,

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{\nabla}\varphi. \tag{14.14}$$

Как мы помним из раздела 7.3, это согласуется с *микроскопическим* определением квантовой плотности тока. Обобщая это определение на макроскопическую волновую функцию (14.10), можем написать

$$\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2mi}\Big(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\Big) = n_s\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{\nabla}\varphi = n_s\mathbf{v}_s. \tag{14.15}$$

Здесь мы говорим только о *сверхтекучем* движении, которое может быть описано фазовой динамикой (14.13) без элементарных возбуждений. Такие возбуждения заимствовали бы энергию из сверхтекучего потока, что привело бы к трению и диссипации. Если это *нормальное* движение присутствует наряду с сверхтекучим, нужно добавить соответствующий нормальный ток.

Уравнение (14.14) можно применять, когда сверхтекучее движение является поступательным, по крайней мере локально. Если элемент объёма движется как целое с полным импульсом $\mathbf{P} = N\mathbf{p}$, микроскопическая волновая функция $\Psi_0(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N)$ принимает вид $\Psi = \Psi_0 \exp[(i/\hbar)(\mathbf{P}\cdot\mathbf{R})]$, где $\mathbf{R} = (1/N)\sum_{a=1}^{N} \mathbf{r}_a$ — радиус-вектор центра масс. В этом случае изменение полной микроскопической фазы есть $\delta\varphi = (m\mathbf{v}_s/\hbar)\cdot\sum_a \mathbf{r}_a$, т. е. для *всех* частиц a, $\partial\delta\varphi/\partial\mathbf{r}_a = m\mathbf{v}_s/\hbar$ в согласии с (14.14). Эти аргументы несправедливы, если движение имеет вихревой характер. Но тогда уравнение (14.14) в любом случае неверно, поскольку оно предсказывает безвихревое движение,

$$\operatorname{curl}\mathbf{v}_s = 0. \tag{14.16}$$

Возможна более общая формулировка *квантовой гидродинамики* [1], в которой операторы разных компонент вектора скорости $\mathbf{v}(\mathbf{R})$ *не коммутируют*. Присутствие $\operatorname{curl}\mathbf{v}$ работает подобно магнитному полю (см. (13.20)).

Задача 14.1

а) Определим микроскопические операторы плотности и тока для системы многих тождественных частиц как

$$\hat{n}(\mathbf{R}) = \sum_a \delta(\hat{\mathbf{r}}_a - \mathbf{R}) \tag{14.17}$$

и

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2m}\sum_a [\hat{\mathbf{p}}_a, \delta(\hat{\mathbf{r}}_a - \mathbf{R})]_+ \tag{14.18}$$

соответственно (уравнение (14.18) содержит антикоммутатор (6.68), необходимый, чтобы сделать ток эрмитовым). Тривиальным образом операторы плотности (14.17) для различных точек коммутируют. Выведите коммутационные соотношения

$$[\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{R}), \hat{n}(\mathbf{R}')] = -i\hbar\hat{n}(\mathbf{R})\nabla_{\mathbf{R}}\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}'). \tag{14.19}$$

б) Микроскопическое поле скоростей может быть определено следующим образом (в точках, где плотность n отлична от нуля):

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\hat{n}(\mathbf{R})}, \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{R})\right]_+. \tag{14.20}$$

Выведите коммутационные соотношения

$$[\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{R}), \hat{n}(\mathbf{R}')] = -i\,\frac{\hbar}{m}\,\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}\,\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}'), \tag{14.21}$$

$$[\hat{v}_i(\mathbf{R}), \hat{v}_j(\mathbf{R}')] = -i\hbar\varepsilon_{ijk}\,\frac{1}{\hat{n}(\mathbf{R})}\,(\mathrm{curl}\,\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{R}))_k\,\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}'). \tag{14.22}$$

Обратите внимание на следствие уравнения (14.21): оператор плотности коммутирует с ротором скорости,

$$[\hat{n}(\mathbf{R}), \mathrm{curl}\,\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{R}')] = 0. \tag{14.23}$$

Отсюда следует, что существует класс безвихревых состояний, где $\mathrm{curl}\,\hat{\mathbf{v}} \equiv 0$, компоненты скорости коммутируют, уравнение (14.14) определяет оператор фазы $\hat{\varphi}$ (с точностью до аддитивной константы) и *потенциал скоростей* $\hat{\zeta} = (\hbar/m)\hat{\varphi}$ и плотность являются канонически сопряженными величинами,

$$[\hat{\zeta}(\mathbf{R}), \hat{n}(\mathbf{R}')] = -i\hbar\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}'), \quad \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{R}) = \boldsymbol{\nabla}\hat{\zeta}(\mathbf{R}). \tag{14.24}$$

14.4 Динамика макроскопического когерентного состояния

Величина сверхтекучей скорости или плотности тока определяется каноническим уравнением (12.63), которое показывает изменение во времени среднего числа частиц в элементе объёма,

$$\hbar\,\frac{dN}{dt} = \frac{\partial E}{\partial \varphi}. \tag{14.25}$$

В равновесии фаза является постоянной величиной, и энергия не зависит от её конкретного значения. Тогда ток отсутствует.

Рассмотрим два элемента объёма ΔV_1 и ΔV_2 в когерентных состояниях с *различными* фазами φ_1 и φ_2. Если элементы объёма взаимодействуют (имеют общую границу или расположены достаточно близко, так что их микроскопические волновые функции перекрываются), полная энергия зависит от *разности фаз* $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$. Эта энергия может быть записана в виде

$$E = E_1 + E_2 + W(\varphi), \tag{14.26}$$

где $W(\varphi)$ описывает взаимодействие элементов. Уравнение (14.25) показывает, что возникает поток частиц между этими элементами объёма,

$$\dot{N}_1 = -\dot{N}_2 = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial W}{\partial \varphi}. \tag{14.27}$$

Функция взаимодействия $W(\varphi)$ не является универсальной и не может быть найдена только из общих соображений. Ясно только, что это периодическая функция φ. Если отсутствуют внешние поля, которые могли бы создать преимущественное направление потока, то $W(\varphi) = W(-\varphi)$ и эта чётная функция может быть представлена рядом Фурье, который будет содержать только косинусы $\cos(n\varphi)$. n-ый член этого ряда происходит от оператора, который, действуя на когерентный волновой пакет $\sum_N C_N|N\rangle$ с коэффициентами (14.7), умножает все компоненты на $\exp(\pm in\varphi) = \exp[\pm in(\varphi_1 - \varphi_2)]$. Как видно из структуры когерентных состояний, этот член описывает перенос $\pm n$ частиц из ΔV_2 в ΔV_1. Если ограничиться элементарными процессами, когда границу раздела переходят отдельные частицы (в сверхпроводниках — отдельные коррелированные пары), можно предположить, что

$$W(\varphi) = -\hbar g \cos\varphi, \tag{14.28}$$

где константа $g > 0$, так как в равновесии, $\varphi = 0$, энергия должна быть минимальной.

В приближении (14.28) скорость обмена частицами равна

$$\dot{N}_1 = -\dot{N}_2 = g\sin\varphi. \tag{14.29}$$

Таким образом, величина g, являясь матричным элементом переноса частиц, определяет максимально возможный ток $\dot{N}_1$. Ещё бо́льшая величина тока может быть достигнута только с помощью нормальной (несверхтекучей) компоненты. Согласно формулам (14.29) и (14.12) сверхтекучий ток поддерживается перепадом $\Delta\mu$ химического потенциала,

$$\dot{N}_1 = -\dot{N}_2 = g\sin\left(\int_0^t dt'\,\frac{\Delta\mu}{\hbar} + \varphi_0\right), \tag{14.30}$$

где φ_0 является начальной разностью фаз. Полную волновую функцию двух контактирующих когерентных элементов объёма можно записать

в виде

$$\Psi(\mathbf{R}) = \sqrt{n_1(\mathbf{R})}\, e^{i\varphi_1} + \sqrt{n_2(\mathbf{R})}\, e^{i\varphi_2}, \tag{14.31}$$

где плотности $n_1(\mathbf{R})$ и $n_2(\mathbf{R})$ падают за пределами своих объёмов и слабо перекрываются хвостами. Тогда квантовый ток через контакт [79] такой же, как найденный в задаче 7.5,

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{n_1 n_2}\left(\boldsymbol{\nabla}\ln\frac{n_1}{n_2}\right)\sin\varphi; \tag{14.32}$$

амплитуда тока здесь определяется степенью перекрытия плотностей.

Переходя от дискретных элементов объёма к *непрерывной среде*, вместо $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ будем иметь дело с $\boldsymbol{\nabla}\varphi$. При этом энергия взаимодействия V является функционалом этого градиента. Если фаза меняется плавно, первое слагаемое в градиентном разложении V можно записать в виде

$$W = \frac{\hbar}{2}\int d^3R\, c(\mathbf{R})(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2. \tag{14.33}$$

Формула для плотности тока аналогична уравнению (14.27):

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\hbar}\frac{\delta W}{\delta(\boldsymbol{\nabla}\varphi)} = c\boldsymbol{\nabla}\varphi. \tag{14.34}$$

Сравнивая $\mathbf{j} = n_s\mathbf{v}_s$ из (14.34) с (14.14), определяем

$$c(\mathbf{R}) = \frac{\hbar}{m}\, n_s(\mathbf{R}). \tag{14.35}$$

С этой идентификацией энергия взаимодействия (14.33) соседних элементов объёма сводится к кинетической энергии возникающего тока,

$$W = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3R\, n_s(\mathbf{R})(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 = \frac{m}{2}\int d^3R\, n_s(\mathbf{R})\mathbf{v}_s^2. \tag{14.36}$$

14.5 Эффекты Джозефсона

Макроскопическая квантовая когерентность ярко проявляется при джозефсоновском туннелировании [80]. Эти эффекты возникают при слабом контакте (рис. 14.1) двух сверхпроводников, разделённых тонким слоем вакуума, изолятора или нормального металла.

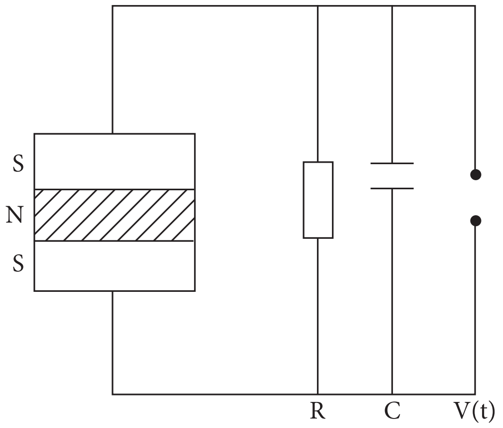

Рис. 14.1: Схема эффекта Джозефсона и эквивалентной электрической цепи

Как мы уже упоминали, носителями тока в сверхпроводниках служат пары коррелированных электронов (*куперовские пары, 1956*), $e \Rightarrow 2e$. Слабый контакт играет роль потенциального барьера для этих пар. Если ширина контакта достаточно мала, меньше, чем длина когерентности пары (раздел IV.12.9), парные электроны могут туннелировать один за другим, сохраняя корреляции. Туннелирование создаёт электрический ток I. Пока величина тока не превышает своего критического значения I_c, ток остается сверхпроводящим и не требует никакого напряжения на контакте для его поддержания. Критическая величина определяется свойствами барьера, которые определяют амплитуду туннелирования; $I_c \to 0$, если контакт является слишком широким и электроны теряют когерентность при туннелировании.

Как и в уравнении (14.29), при *стационарном эффекте Джозефсона* ток $I < I_c$ и разность фаз φ через барьер устанавливается на таком уровне, чтобы было

$$I = I_c \sin \varphi. \tag{14.37}$$

Если ток в цепи превышает I_c, разность восполняется нормальным током. Тогда должно появиться напряжение V на контакте для поддержания нормального тока. Это создаёт разность $\Delta\mu = 2eV$ химических потенциалов для пар, и эффект Джозефсона становится *нестационарным*, поскольку фаза теперь зависит от времени (уравнение (14.13)), причём соответствующая

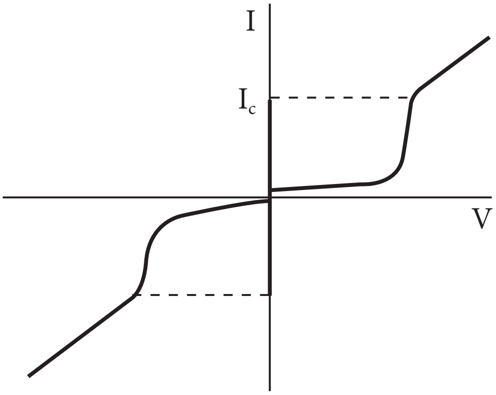

Рис. 14.2: Стационарный и нестационарный эффект Джозефсона (вольт-амперная характеристика)

частота

$$\omega = \frac{2eV}{\hbar}. \tag{14.38}$$

Действительно, туннелирование пар происходит с уменьшением энергии пары на $2eV$, которая превращается в квант $\hbar\omega$ переменного электромагнитного поля (рис. 14.2). Здесь контакт Джозефсона выступает в роли генератора микроволнового излучения.

Задача 14.2

Рассмотрите барьер Джозефсона с фиксированным постоянным напряжением V_0 и внешним переменным напряжением $\tilde{V}\cos(\tilde{\omega}t + \tilde{\varphi})$. Рассчитать ток через барьер.

Решение.

Фаза волновой функции находится из уравнения (14.30), а ток из (14.37):

$$I = I_c \sin\left\{\frac{2e}{\hbar}\int_0^t dt'[V_0 + \tilde{V}\cos(\tilde{\omega}t' + \tilde{\varphi})] + \varphi_0\right\} \tag{14.39}$$

или после интегрирования

$$I = I_c \sin\left[\frac{2eV_0 t}{\hbar} + \frac{2e\tilde{V}}{\hbar\tilde{\omega}}\sin(\tilde{\omega}t + \tilde{\varphi}) + \varphi_0\right]. \tag{14.40}$$

Это выражение можно записать в виде ряда по функциям Бесселя J_k целого индекса,

$$I = I_c \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-)^k J_k \left(\frac{2e\tilde{V}}{\hbar\tilde{\omega}} \right) \sin \left[\left(\frac{2eV_0}{\hbar} - k\tilde{\omega} \right) t - k\tilde{\varphi} + \varphi_0 \right]. \qquad (14.41)$$

Здесь используется интегральное представление этих функций Бесселя,

$$J_k(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \, \cos(z \sin\theta - k\theta). \qquad (14.42)$$

Иногда уравнение (14.42) берётся в качестве определения функции Бесселя целого порядка; можно показать, что она удовлетворяет уравнению Бесселя (9.76) для целых $\nu = k$. Вычисляя производные по z под знаком интеграла, находим

$$\frac{dJ_k}{dz} \equiv J'_k(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \, \sin\theta \, \cos(z \sin\theta - k\theta) \qquad (14.43)$$

и

$$\begin{aligned} \Big(zJ'_k(z)\Big)' = & \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \, [-z \sin^2\theta \, \cos(k\theta - z\sin\theta) + \\ & + \sin\theta \, \sin(k\theta - z\sin\theta)]. \end{aligned} \qquad (14.44)$$

В последнем члене (14.44) интегрируем по частям и получаем

$$\Big(zJ'_k(z)\Big)' = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \, (-z + k\cos\theta) \cos(k\theta - z\sin\theta). \qquad (14.45)$$

Объединяя эти результаты, имеем

$$z\Big(zJ'_k(z)\Big)' + (z^2 - k^2) J_k(z) = \frac{k}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta (z\cos\theta - k) \cos(k\theta - z\sin\theta). \qquad (14.46)$$

Интеграл в (14.46) равен $-\sin(k\theta - z\sin\theta)$, что исчезает на границах интегрирования, если число k *целое*. Следовательно, функция (14.42) удовлетворяет уравнению

$$z^2 J''_k + zJ'_k + (z^2 - k^2) J_k = 0, \qquad (14.47)$$

которое есть не что иное, как уравнение Бесселя (9.76). Сравнение первых членов разложения в ряд в окрестности точки $z = 0$ показывает, что это решение уравнения Бесселя совпадает с рядом (9.82), который был нашим первоначальным определением функции Бесселя.

Ток (14.41), ожидаемый в ситуации задачи 14.2, имеет *постоянную компоненту*

$$\bar{I}_k = I_c(-)^k J_k\left(k\frac{\tilde{V}}{V_0}\right)\sin(\varphi_0 - k\tilde{\varphi}), \tag{14.48}$$

если выполняется *условие резонанса*

$$2eV_0 = k\hbar\tilde{\omega}. \tag{14.49}$$

При этом туннелировавшая пара высвобождает (или поглощает) энергию, которая в точности равна той, что необходимо для испускания (или поглощения) k квантов микроволнового излучения. Для данного значения V_0 существует интервал токов

$$\Delta\bar{I}_k = 2I_cJ_k\left(k\frac{\tilde{V}}{V_0}\right), \tag{14.50}$$

где, как и в стационарном эффекте Джозефсона (14.37), V_0 не меняется, в то время как фаза φ_0 подстраивается таким образом, чтобы удовлетворить условию (14.48); когда это невозможно, происходит скачок напряжения. Высшие гармоники, $\sim\cos(n\varphi)$, в энергии взаимодействия (14.28) приведут к дробным резонансам, когда $2eV_0 = (k/n)\hbar\omega$. В этом менее вероятном процессе туннелируют n пар с испусканием k квантов.

Глядя на уравнение (14.38), мы видим, что измерения напряжения и частоты, т. е. полностью *макроскопический* эксперимент, позволяют найти значение отношения $\hbar/e$ фундаментальных констант природы [81]. Точность результатов определяется точностью эталонов Вольта (на самом деле вольтметр измеряет как раз величину $\Delta\mu$, количество работы, необходимое для перемещения элементарных носителей заряда). Этот метод, наряду с квантовым эффектом Холла (13.88), является одним из лучших доступных методов для измерения мировых констант; его преимуществом является то, что он не содержит неопределённостей, связанных с теоретическими расчётами тонких эффектов квантовой электродинамики.

Задача 14.3

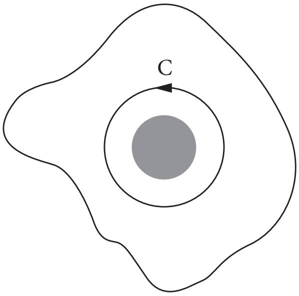

Рис. 14.3: Исключённая область и квантование циркуляции

Показать, что напряжение на контакте Джозефсона с нормальным сопротивлением R при фиксированном токе $I > I_c$ (рис. 14.1) имеет вид

$$V(t) = \frac{I^2 - I_c^2}{I + I_c \cos(\omega t)} R, \tag{14.51}$$

где

$$\omega = \frac{2e}{\hbar} \sqrt{I^2 - I_c^2}\, R. \tag{14.52}$$

Среднее за период колебаний значения напряжения (14.51) вновь согласуется с (14.38), $\bar{V} = \hbar\omega/2e$.

14.6 Квантование циркуляции и квантовые вихри

Макроскопические квантовые эффекты чувствительны к *топологии* доступного пространства. Пусть область, где скорость сверхтекучего движения описывается как градиент потенциала (уравнение (14.14)), является *многосвязной*, т. е. существует контур $\mathcal{C}$, который не может быть сжат в точку непрерывной деформацией целиком внутри сверхтекучей области. Связность может быть нарушена присутствием вихрей, $\mathrm{curl}\,\mathbf{v} \neq 0$, или закрытой непроницаемой границей (рис. 14.3). В этом случае фаза φ перестает быть *однозначной* функцией координат $\mathbf{R}$. В соответствии с *периодичностью* волновой функции мы по-прежнему требуем, чтобы изменение $\Delta\varphi$ фазы после полного обхода контура было кратно 2π,

$$\Delta\varphi = \oint_{\mathcal{C}} (\nabla\varphi \cdot d\mathbf{l}) = 2\pi n, \quad n = \text{целое число}. \tag{14.53}$$

Так как контур $\mathcal{C}$ находится полностью внутри сверхтекучей области, где справедливо уравнение (14.14), мы приходим к квантованию *циркуляции* сверхтекучей скорости,

$$\Gamma \equiv \oint_{\mathcal{C}} (\mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l}) = \frac{2\pi\hbar}{m} n \equiv \Gamma_0 n. \tag{14.54}$$

В односвязной области контур $\mathcal{C}$ можно непрерывно сжать в точку. Так как дискретное квантовое число n не может непрерывно меняться, оно остается постоянным, и, следовательно, если нет никакой сингулярности, единственно возможным является значение $n = 0$. В противоположность этому, если контур $\mathcal{C}$ окружает отверстие или область, где нарушается безвихревой характер движения, условие (14.54) показывает, что поток $\mathrm{curl}\,\mathbf{v}$ через поверхность, опирающуюся на контур, квантуется,

$$\int d\mathbf{S} \cdot \mathrm{curl}\,\mathbf{v}_s = \frac{2\pi\hbar}{m} n. \tag{14.55}$$

В частности, $\mathrm{curl}\,\mathbf{v}_s$ может быть сконцентрирован в тонких *вихревых линиях*, каждая из которых несёт целое число квантов потока [82].

Задача 14.4

Рассмотрим изолированную вихревую линию, несущую n квантов циркуляции и расположенную вдоль центральной оси кругового цилиндра. Пренебрегая малым радиусом линии, показать, что фаза макроскопической волновой функции вокруг линии пропорциональна азимутальному углу α с целочисленным коэффициентом пропорциональности: $\varphi = n\alpha$, в то время как поле скоростей имеет вид

$$v = v_\alpha(r) = \frac{\hbar}{mr} n. \tag{14.56}$$

Благодаря осевой симметрии движения, компонента L_z полного орбитального момента импульса жидкости вдоль оси цилиндра сохраняется. Для состояния с n квантами циркуляции орбитальный момент в расчёте на одну частицу есть

$$\ell_z = \frac{L_z}{N} = m v_\alpha(r) r = n\hbar. \tag{14.57}$$

Для возбуждения вихревой линии в сверхтекучей жидкости можно вращать контейнер. Можно оценить критическую угловую скорость Ω_c, при

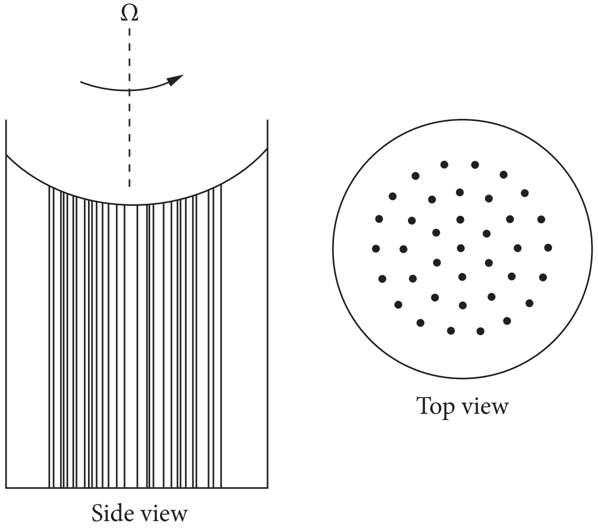

Рис. 14.4: Вращение вихревой решетки [84]

которой становится энергетически выгодным создание первого вихря, как это было обнаружено в экспериментах со сверхтекучим гелием-4 [83]. Равновесие вращающейся жидкости соответствует минимальной энергии $\tilde{E}$ во *вращающейся системе отсчёта* [13]; эту величину иногда называют функцией *Рауса*,

$$\widetilde{E}(\mathbf{\Omega}) = E(0) + W - (\tilde{\mathbf{\Omega}} \cdot \mathbf{L}), \tag{14.58}$$

где $\mathbf{L}$ — вектор углового момента. В цилиндрической геометрии сосуда, вращающегося вокруг оси симметрии, $\Omega = \Omega_z$ и $L = L_z$. При критической угловой скорости, $\Omega = \Omega_c$, состояние с вихревой линией в центре становится основным с энергией $\widetilde{E}(\Omega_c)$ (рис. 14.4). При этом мы получаем увеличение кинетической энергии жидкости W, которая даётся выражением (14.36) с квантованным полем скоростей (14.56),

$$W = \frac{m}{2} n_s \int d^3r \left(\frac{\hbar n}{mr}\right)^2. \tag{14.59}$$

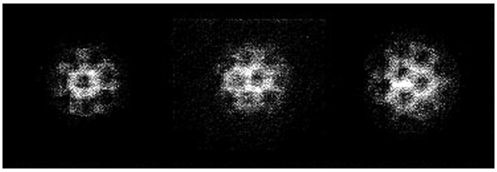

Рис. 14.5: Вихревая решётка во вращающемся бозе-конденсате атомов рубидия [85]

Здесь интеграл берётся по объёму вращающегося цилиндра. Если высота цилиндра Z, а радиус R, получаем

$$W = Z\pi n_s \frac{\hbar^2 n^2}{m} \int_0^R \frac{dr}{r}. \tag{14.60}$$

Радиальный интеграл расходится на нижнем пределе. Физически нижний предел соответствует естественному радиусу ядра вихря ξ. Внутри ядра сверхтекучесть разрушена и радиус этой области с нормальной жидкостью определяется взаимодействием между частицами (уравнение (14.1)). Этот радиус порядка атомных размеров. Точное значение радиуса несущественно из-за слабой логарифмической зависимости энергии от него:

$$W = Z\pi n_s \frac{\hbar^2 n^2}{m} \ln \frac{R}{\xi}. \tag{14.61}$$

Как всегда с гидродинамическими вихрями, эта энергия пропорциональна длине Z вихревой линии. Энергия растёт пропорционально квадрату, n^2, квантового числа циркуляции. Поэтому первый вихрь будет иметь единичную циркуляцию, $n = 1$. Вихрь, как следует из (14.58), при увеличении скорости вращения возникает, когда $\Omega L = W$. Но полный угловой момент единичного вихря — $N\hbar$, где $N = Z\pi R^2 n_s$ есть число атомов в сверхтекучей жидкости. Это определяет критическую скорость

$$\Omega_c = \frac{W(n=1)}{N\hbar} = \frac{\hbar}{mR^2} \ln \frac{R}{\xi}. \tag{14.62}$$

За исключением логарифмического множителя, эту оценку можно было бы получить с помощью простых рассуждений в духе соотношения неопределённости.

Если скорость вращения очень медленно, *адиабатически*, увеличивается, безвихревое состояние остаётся основным состоянием из-за сохранения момента импульса. Для создания вихря нужно возмущение, которое портит

вращательную симметрию и меняет момент импульса жидкости. На практике это может произойти из-за любой малой неоднородности (царапины) на боковой стороне цилиндра. Тогда вихрь рождается около поверхности и затем переносится полем скоростей в центр. При дальнейшем увеличении угловой скорости рождаются новые вихри, каждый с одним квантом циркуляции и полем скоростей (14.56) вокруг соответствующих осей, что можно увидеть экспериментально, поскольку концы вихревых линий выходят на поверхность жидкости и могут быть сфотографированы. Их равновесные положения определяются взаимодействием вихрей. Глядя на форму их полей скоростей, мы видим, что они должны отталкиваться друг от друга. Таким образом, при большом количестве вихревых линий они сформируют вращающуюся *решетку* [86] определённой плотности ρ_v (см. схему рис. 14.4) и реальную фотографию вихревой решетки в ловушке холодных атомов (рис. 14.5).

В непосредственной близости от каждой вихревой линии, $\mathbf{r} \approx \mathbf{r}_0$, поле скоростей по-прежнему растёт, как в (14.56). Если период решетки намного больше, чем радиус ядра вихря ξ, можно предположить, что вихревые линии очень тонкие и, согласно (14.55), для $n = 1$:

$$\operatorname{curl} \mathbf{v}_s = \frac{2\pi\hbar}{m}\,\delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\mathbf{e}^{(z)}, \tag{14.63}$$

где мы воспользовались двумерной дельта-функцией. Тем не менее в более крупном масштабе, который больше, чем расстояние между вихрями, *среднее поле скоростей* решётки (которая вращается как целое) должно соответствовать наиболее энергетически выгодному типу вращения — вращению *твердого тела*. Соответствующая средняя скорость должна быть равна

$$\overline{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = [\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}]. \tag{14.64}$$

Эту линейную зависимость легко можно понять, если рассмотреть для произвольного вихря на расстоянии r от центра число других вихрей рядом с ним, которые поворачивают его влево и вправо, считая постоянной их равновесную плотность. При таком среднем поле скоростей мы имеем

$$\operatorname{curl} \overline{\mathbf{v}} = 2\boldsymbol{\Omega}. \tag{14.65}$$

Для создания такой завихрённости число вихрей на единицу площади должно быть

$$\rho_v = \frac{|\mathrm{curl}\,\overline{\mathbf{v}}|}{2\pi\hbar/m} = \frac{m}{\pi\hbar}\,\Omega, \tag{14.66}$$

т. е. оно растёт линейно со скоростью вращения. Когда вихрей становится так много, что их сердцевины начинают перекрываться, сверхтекучесть разрушается.

14.7 Квантование магнитного потока и электродинамика Лондона

В сверхтекучей системе *заряженных* частиц (сверхпроводник) вдобавок можно ожидать когерентных *магнитных* эффектов. По существу, система в целом ведёт себя во многом аналогично одной частице в магнитном поле (глава 13). Требования *калибровочной инвариантности* приводят к следующей плотности тока, как в (13.28),

$$\mathbf{j}_s = n_s\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m'}\,n_s\boldsymbol{\nabla}\varphi - \frac{e'}{m'c}\,n_s\mathbf{A}, \tag{14.67}$$

где $\mathbf{A}$ — вектор-потенциал магнитного поля, а m' и e' — масса и заряд носителей тока соответственно, $2m$ и $2e$ для электронных пар.

Для любого замкнутого контура $\mathcal{C}$, полностью расположенного в области действия уравнения (14.67) для тока, условие периодичности для волновой функции даёт аналогично (14.53)

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} + \frac{e'}{m'c}\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l} = \frac{2\pi\hbar}{m'}n \tag{14.68}$$

с целым числом n. Как и ранее, для односвязной области $n = 0$. Тогда фаза φ однозначна и она может быть удалена калибровочным преобразованием (сравните 13.9 и 13.26),

$$\mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \boldsymbol{\nabla}f, \quad \Psi \Rightarrow \Psi' = \Psi e^{(ie'/\hbar c)f}, \quad f = -\frac{\hbar c}{e'}\,\varphi. \tag{14.69}$$

В этой *калибровке Лондона* ток (14.67) сводится к своему второму слагаемому, который является диамагнитным током (13.28),

$$\mathbf{j}_s = -\frac{n_s e'}{m'c}\,\mathbf{A}. \tag{14.70}$$

Теперь сверхпроводящий электрический ток, $\mathbf{j}_e = e'\mathbf{j}_s$, *локально* связан с векторным потенциалом,

$$\mathbf{j}_e = -\Lambda\mathbf{A}, \quad \Lambda = \frac{n_s e'^2}{m'c}. \tag{14.71}$$

Это соотношение служит *материальным уравнением*, характеризующим сверхпроводящую среду, и вместе с уравнениями Максвелла определяет *локальную электродинамику Лондона.* В частности, можно сразу предсказать *эффект Мейсснера*: статическое магнитное поле выталкивается из объёма сверхпроводника. Статическое поле $\boldsymbol{\mathcal{B}} = \operatorname{curl}\mathbf{A}$ удовлетворяет уравнению Максвелла

$$\operatorname{curl}\boldsymbol{\mathcal{B}} = \frac{4\pi}{c}\,\mathbf{j}_e. \tag{14.72}$$

Применяя к уравнению (14.72) операцию ротора и принимая во внимание еще одно уравнение Максвелла

$$\operatorname{div}\boldsymbol{\mathcal{B}} = 0 \tag{14.73}$$

при условии, что n_s и Λ постоянны по всему объему, и используя в правой части равенство, которое следует из (14.71),

$$\operatorname{curl}\mathbf{j}_e = -\Lambda\boldsymbol{\mathcal{B}}, \tag{14.74}$$

получаем уравнение для магнитного поля,

$$\nabla^2\boldsymbol{\mathcal{B}} = \frac{4\pi\Lambda}{c}\,\boldsymbol{\mathcal{B}}. \tag{14.75}$$

Задача 14.5

Рассмотрите плоскую границу массивного сверхпроводника во внешнем магнитном поле $\mathcal{B}_0$, которое параллельно поверхности. Найти магнитное поле внутри сверхпроводника.

Решение.

Поле экспоненциально спадает вглубь сверхпроводника,

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}(z) = \boldsymbol{\mathcal{B}}_0 e^{-z/\delta_L}, \tag{14.76}$$

где *лондоновская длина проникновения* даётся выражением

$$\delta_L = \sqrt{\frac{c}{4\pi\Lambda}} = \sqrt{\frac{m'c^2}{4\pi n_s e'^2}}. \tag{14.77}$$

То же самое экспоненциальное правило проникновения имеем и для тока $\mathbf{j}$.

В случае многосвязной области уравнение (14.68) приводит к квантованию так называемого *флюксоида*,

$$\Phi + \frac{m'c}{e'} \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = n\Phi_0', \tag{14.78}$$

где

$$\Phi = \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int \boldsymbol{\mathcal{B}} \cdot d\mathbf{S} \tag{14.79}$$

является магнитным потоком через площадь контура $\mathcal{C}$ и

$$\Phi_0' = \frac{2\pi\hbar c}{e'} \tag{14.80}$$

есть квант потока, который вдвое меньше, чем в уравнении (13.36), если $e' = 2e$. Измерение этой величины подтверждает, что в сверхпроводниках ток переносится парами электронов.

Так как магнитное поле и ток существуют только в тонком слое толщиной $\sim \delta_L$ вблизи поверхности для контура $\mathcal{C}$, который находится полностью в объёме сверхпроводника далеко от поверхности, ток на контуре пренебрежимо мал. Тогда квантование флюксоида в (14.78) сводится к квантованию магнитного потока $\Phi = n\Phi_0'$, пронизывающего поверхность контура.

Многосвязная геометрия может быть реализована в присутствии отверстия в сверхпроводнике, а также при неполном эффекте Мейсснера. Последнее имеет место в лондоновских сверхпроводниках в достаточно сильном магнитном поле. Тогда поле проникает в объём сверхпроводника в виде *вихревых* линий, несущих квант магнитного потока, и мы имеем ту же физику, как для вихрей в сверхтекучей жидкости, с заменой внешнего

вращения на магнитное поле. Лондоновская электродинамика с локальным соотношением (14.70) применима, когда длина проникновения δ велика по сравнению с длиной когерентности ξ (размер области корреляции) электронной пары. Например, это имеет место в сверхпроводящих сплавах и керамических сверхпроводниках с высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние. При $\delta > \xi$ становится энергетически выгодным проникновение поля и формирование вихревых линий и решётки вихрей, так как это уменьшает работу выталкивания магнитного поля (большая область радиуса $\sim \delta$ вокруг вихревой линии теперь заполнена магнитным полем), тогда как энергетическая цена такой перестройки небольшая и связана она с нарушением сверхпроводящей когерентности в малом объёме внутри вихревой линии (радиуса $\sim \xi < \delta$). Именно сверхпроводящие сплавы со структурой, закрепляющей положения вихрей, применяются в современных сверхпроводящих магнитах, например в больших ускорителях (движение вихрей связано с омическими потерями). Обратная ситуация, когда $\xi > \delta$, имеет место в таких сверхпроводниках, как чистые сверхпроводящие металлы, и соответствует *электродинамике Пиппарда* со сложным *нелокальным* соотношением между током и векторным потенциалом. В таком случае образование вихревой нити невыгодно энергетически, и в сильном магнитном поле сверхпроводимость разрушается во всём объёме.

В заключение сделаем комментарий, который станет более понятным позже, после главы 1 из тома IV, введение в релятивистскую квантовую механику, и после обсуждения микроскопической теории сверхпроводимости, глава IV.12. Существует глубокая аналогия между эффектом Мейсснера, который мы упрощенно описали с помощью уравнения Лондона (14.75), и появлением массы в релятивистских волновых уравнениях. «Масса» $\widetilde{m}$ здесь соответствует щели в энергетическом спектре элементарных возбуждений — конечной энергии, необходимой для извлечения частицы из когерентного конденсата. Такой энергетический спектр похож на релятивистское выражение $E(p) = c\sqrt{p^2 + \widetilde{m}^2 c^2}$; эффективная масса в случае сверхпроводника пропорциональна лондоновской константе Λ и, следовательно, плотности конденсата n_s. Сам конденсат возникает самосогласованно из-за взаимодействия первичных частиц; это аналогично *хиггсовскому механизму* возникновения массы элементарных частиц в современной теории.

Дополнительная литература: [1, 2, 78, 82, 87–89].

...квазиклассическая физика может быть занимательной, равно как и полезной...
М. Брэк, Р. К. Бхадури, «Квазиклассическая физика»

...квазиклассическая физика не только полезна, но и занимательна.
Д. Пайнс, предисловие к той же книге

Глава 15

Квазиклассическое (ВКБ) приближение

15.1 Эвристическое введение

В предыдущих лекциях мы неоднократно упоминали *квазиклассическую* область, где квантовые результаты можно интерпретировать в классических терминах, и несколько простых квантовых постулатов, связанных с волнами де Бройля и квантованием фазового пространства. Такой подход на самом деле является весьма продуктивным и охватывает много важных вопросов. Начиная с квантования Бора-Зоммерфельда, метод получил математическое обоснование и дальнейшее развитие в работах *Вентцеля, Крамерса и Бриллюэна (1926)* и был назван позже *методом ВКБ*; некоторые авторы называют его методом *ДВКБ*, добавляя имя математика *Гарольда Джеффриса*, хотя многие математические идеи были выдвинуты ещё раньше *Стоксом* и другими. Квазиклассический подход получил новый импульс в последнее время [5, 90].

Начнём с эвристического подхода на основе нашего предыдущего опыта и интуитивных аргументов. Рассмотрим стационарные состояния одномерного движения в потенциальном поле $U(x)$ (рис. 15.1). В областях (ab) и (bc) характер волновых функций различается. Область между классическими точками поворота a и b разрешена в классической механике. Классический импульс, соответствующий энергии E,

$$p(x;E) = \sqrt{2m[E - U(x)]}, \tag{15.1}$$

обращается в нуль в точках поворота, $U(a) = U(b) = E$, где частица, двигающаяся в потенциальной яме, отражается. В квантовой механике существует конечная вероятность проникновения за точками поворота в подбарьерную область; для конечной ширины барьера туннелирование за его пределы становится возможным. Тем не менее для достаточно широкого

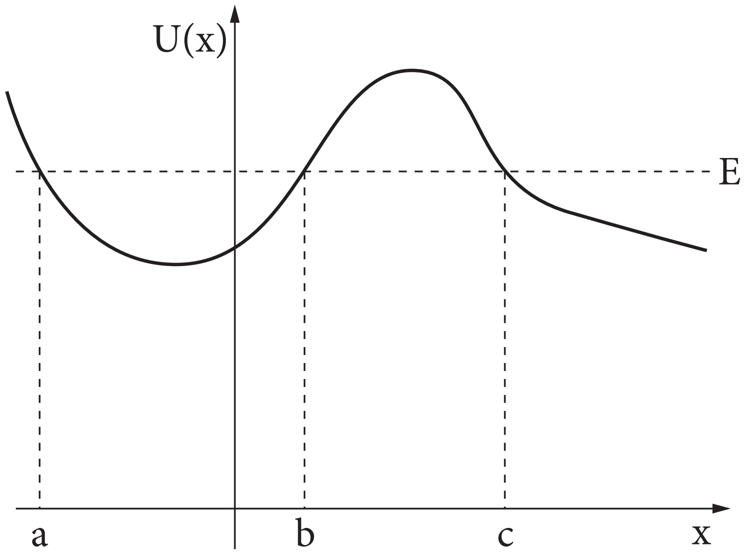

Рис. 15.1: Потенциал $U(x)$ с классически разрешёнными и запрещёнными областями и точками поворота

барьера вероятность туннелирования экспоненциально мала (раздел 2.7) и жизнь частицы в основном сосредоточена в классической области (ab). Для *плавно меняющегося* потенциального поля теоремы Эренфеста (раздел 7.6) показывают, что движение волнового пакета в классически разрешённой области близко к ньютоновскому. Поэтому естественно ожидать, что для таких потенциалов можно найти приближение, которое охватывает предельный переход от уравнения Шредингера к классической динамике и в то же время учитывает основные квантовые эффекты.

В классическом случае стационарная плотность вероятности $\rho(x)$ нахождения (в среднем в течение длительного времени) частицы в окрестности dx вблизи точки x пропорциональна (сравните с уравнениями (3.7) и (6.176)) времени dt прохождения отрезка dx,

$$dP = \rho(x)dx \propto dt, \tag{15.2}$$

и, следовательно, обратно пропорциональна локальной скорости или импульсу,

$$\rho(x) \propto \frac{1}{(dx/dt)} = \frac{1}{v(x)}, \quad v(x) = \frac{p(x)}{m} = \sqrt{\frac{2}{m}\,[E - U(x)]}. \tag{15.3}$$

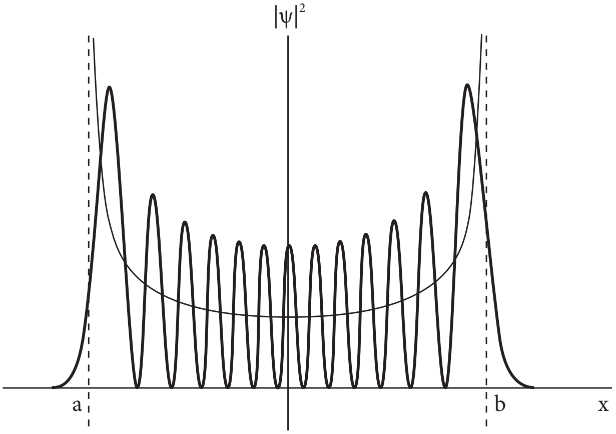

Рис. 15.2: Качественное поведение квазиклассической (короткие волны) функции в плавном потенциале с двумя точками поворота, тонкая линия показывает $1/v(x)$

Если решение имеет полуклассический характер, можно предположить, что квантовая плотность вероятности $|\Psi(x)|^2$ будет близка к $\rho(x)$ из уравнения (15.3). Поскольку зависимость от времени стационарной волновой функции экспоненциальная, можно ожидать, что квазиклассическая волновая функция будет иметь вид

$$\Psi(x,t) = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(x)}}\, e^{(i/\hbar)[\pm S(x)-Et]}, \tag{15.4}$$

где два знака перед неизвестной фазой $S(x)$ соответствуют волнам, распространяющимся в противоположных направлениях оси x.

Создается впечатление, что как классическая плотность, $\rho(x)$, так и её предполагаемый квантовый предшественник, $\Psi(x)$, будут иметь особенность в точке поворота, где $p(x) \to 0$ и частица движется очень медленно. Однако уравнение Шредингера не имеет особенностей в точках поворота, так что точное квантовое решение не может иметь такое поведение — вспомним, например, задачу об однородном поле и функцию Эйри (раздел 9.9). Тем не менее уравнение (15.4) может дать разумное приближение, так как корневая особенность является *интегрируемой* ($\int_a dx/(x-a)^{1/2}$ сходится в окрестности точки $x = a$) и окрестность точки поворота даже в приближении (15.4) не даёт значительный вклад в интеграл $\int_a dx\,|\Psi(x)|^2$.

Понятие классического импульса может сохранить своё значение в квантовой теории, только если функция $p(x)$ изменяется плавно. Тогда мы можем определить его в относительно широкой области движения, не прибегая к принудительной сильной локализации частицы (рис. 15.2). Средняя вероятность $|\psi|^2$ ведёт себя похоже на $1/v(x)$ с максимумами (но не особенностями) вблизи точек поворота. С теми же оговорками можно использовать понятия переменной длиной волны $\lambda(x) = h/p(x)$ и волнового числа $k(x) = p(x)/\hbar$. Приращение фазы квантовой волны на расстоянии dx составляет $k(x)dx$, в то время как в виде (15.4) это изменение записывается как $\pm dS/\hbar$. Таким образом, фаза квазиклассической волновой функции $S(x)/\hbar$ должна удовлетворять соотношению $\pm dS = \hbar k(x)dx = p(x)dx$ и, следовательно,

$$S(x) = \int^{x} dx\, p(x). \tag{15.5}$$

Мы пришли к выводу, что общее квазиклассическое решение в классически разрешённой области можно приближённо представить в виде

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ A e^{(i/\hbar)\int^{x} p\,dx} + B e^{-(i/\hbar)\int^{x} p\,dx} \right\} e^{-(i/\hbar)Et}, \tag{15.6}$$

где нижние пределы интегралов произвольны, поскольку их вклад всегда может быть включен в фазы соответствующих амплитуд. Теперь наша задача найти, при каких условиях уравнение Шрёдингера допускает такие решения.

Задача 15.1

Представление (15.6) порождает точный, но *нелинейный* подход [91,92] к решению уравнения Шрёдингера (9.5), который известен как *метод фазовых интегралов*. Подразумевается, что решение принимает вид, аналогичный (15.6), но с амплитудами $A(x)$ и $B(x)$, которые являются неизвестными функциями от x,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left\{ A(x) e^{iS(x)} + B(x) e^{-iS(x)} \right\}, \quad S(x) = \int_{x_0}^{x} dx' k(x'). \tag{15.7}$$

С двумя неизвестными функциями у нас есть свобода наложить ещё одно условие, которое принимается как выражение для производной,

$$\psi'(x) = i\sqrt{k(x)} \left\{ A(x) e^{iS(x)} - B(x) e^{-iS(x)} \right\}, \tag{15.8}$$

и выбрано таким образом, как если бы дифференцировались только фазовые экспоненты в уравнении (15.7). Покажите, что

а) функции $A(x)$ и $B(x)$ удовлетворяют связанной системе уравнений,

$$A'(x) = f(x)e^{-2iS(x)}B(x), \quad B'(x) = f(x)e^{2iS(x)}A(x), \quad f(x) = \frac{k'(x)}{2k(x)}; \tag{15.9}$$

б) в классически разрешённой области $E > U(x)$ имеет место сохранение потока,

$$|A(x)|^2 - |B(x)|^2 = \text{const}; \tag{15.10}$$

в) вся проблема может быть сведена к *уравнению Риккати* для функции отражения $R(x) = -B(x)/A(x)$,

$$R'(x) = -f(x)e^{2iS(x)} + f(x)e^{-2iS(x)}R^2(x); \tag{15.11}$$

г) определяя фазу отражения $\vartheta(x)$ (не обязательно действительную) по формуле

$$R(x) = -e^{-2i\vartheta(x)}, \tag{15.12}$$

получаем уравнение

$$\vartheta'(x) = f(x)\sin\{2[S(x) + \vartheta(x)]\}, \tag{15.13}$$

которое может быть удобно для численного решения.

15.2 Квазиклассическое приближение

Мы показали в разделе 7.3, что для волновой функции, записанной в терминах двух действительных функций — амплитуды $A = \sqrt{\rho}$ и фазы $S/\hbar$, уравнение Шрёдингера эквивалентно системе двух связанных уравнений, одно из которых является уравнением непрерывности, а второе представляет собой классическое уравнение Гамильтона-Якоби с дополнительным квантовым потенциалом. Фаза S аналогична *классическому действию* вдоль траектории (раздел 7.12).

Теперь повторим то же самое для стационарной функции $\psi(\mathbf{r})$ с энергией E. Если

$$\psi(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r})e^{(i/\hbar)S(\mathbf{r})}, \tag{15.14}$$

то, выделяя действительную и мнимую части в стационарном уравнении Шрёдингера, получаем аналогично (7.62)

$$\underline{\mathrm{Im}}: \quad 2(\boldsymbol{\nabla} A \cdot \boldsymbol{\nabla} S) + A\nabla^2 S = 0, \tag{15.15}$$

$$\underline{\mathrm{Re}}: \quad \hbar^2\nabla^2 A = A\Big[(\nabla S)^2 - \mathbf{p}^2(\mathbf{r})\Big]. \tag{15.16}$$

Уравнение (15.15) можно записать в виде

$$\boldsymbol{\nabla}(A^2\boldsymbol{\nabla} S) = 0, \tag{15.17}$$

и оно, в силу (7.61), даёт не зависящее от времени уравнение непрерывности $\boldsymbol{\nabla}\mathbf{j} = 0$.

В *одномерном случае* ($S = S(x)$, $dS/dx \equiv S'$) это уравнение определяет

$$A = \frac{\mathrm{const}}{\sqrt{S'}}. \tag{15.18}$$

Предположим теперь, что в (15.16) левая часть (связанная с квантовым потенциалом из уравнения (7.62)) мала по сравнению с каждым членом в правой части. Так как большие слагаемые должны в сумме сократиться, получаем (в одномерной задаче), игнорируя малую величину $\hbar^2\nabla^2 A$,

$$S'^2 = p^2, \quad S' = \pm p, \quad S = \pm\int^x p(x)\,dx, \tag{15.19}$$

фаза интегрируется по классическому пути. Уравнения (15.18) и (15.19) определяют волновую функцию квазиклассического вида (15.6). Таким образом, данное приближение будет оправдано, если можно пренебречь левой стороной в уравнении (15.16). Отметим, что без этого члена решение (15.19) выражается через *классические* величины, что естественно, поскольку формально приближение соответствует предельному переходу $\hbar \to 0$.

С фазой S, найденной в (15.19), имеем с точностью до несущественной константы

$$A(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}, \tag{15.20}$$

в то время как отброшенный член равен

$$\hbar^2 A'' = \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\Big(\frac{1}{\sqrt{p}}\Big). \tag{15.21}$$

Эта величина должна быть значительно меньше, чем

$$Ap^2 = p^2 \frac{1}{\sqrt{p}} = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \frac{1}{\sqrt{p}}, \tag{15.22}$$

где длина волны определяется как $\lambda = \hbar/p$. Пусть R — характерный размер неоднородности поля и, следовательно, всех величин, которые определяются полем, таких как $p(x)$ или $\lambda(x)$. Это означает, что все производные таких функций можно оценить по порядку величины как $f' \sim f/R$. Тогда критерий малости величины (15.21), по сравнению с (15.22), эквивалентен условию

$$\left(\frac{\lambda}{R}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{(pR)^2} \ll 1. \tag{15.23}$$

Мы получили снова условие (7.102) того, что движение, описываемое квантовой теоремой Эренфеста, имеет квазиньютоновский характер. Классическое действие $\sim pR$ на длине неоднородности должно быть значительно больше, чем квант действия $\hbar$.

Условие, что длина волны мала по сравнению с типичным размером изменения поля, характеризует *геометрическую оптику*. Плавное изменение длины волны аналогично подобному изменению показателя преломления в среде. В местах быстрого изменения показателя преломления происходит заметное отражение света. Таким же образом квантовый волновой пакет перемещается с классической скоростью вдоль ньютоновской траектории, если расстояние R, на котором длина волны $\lambda(x)$ значительно изменяется, намного больше, чем сама длина волны. Тогда локальная длина волны хорошо определена (рис. 15.2). В противном случае быстрые изменения или разрывы потенциала приводят к отражению волн и их интерференция

с первичной волной вызывает существенные квантовые эффекты. Условие

$$\lambda \ll R \tag{15.24}$$

характеризует квазиклассическое приближение как область геометрической оптики для волн де Бройля. Заметим, что отброшенные в решении (15.6) члены имеют малость *второго порядка* по квазиклассическому параметру λ/R.

Требование малости изменении $\delta\lambda = (\partial\lambda/\partial x)\delta x$ длины волны $\lambda(x) = \hbar/p(x)$ на расстоянии $\delta x \sim \lambda$ можно записать в виде

$$\left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\lambda\right| \ll \lambda \quad \rightsquigarrow \quad \left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right| \ll 1 \tag{15.25}$$

или

$$\left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{\partial p}{\partial x}\right| \ll 1. \tag{15.26}$$

Учитывая определение (15.1), имеем цепочку эквивалентных условий,

$$\left|\frac{\hbar m}{p^3}\frac{\partial U}{\partial x}\right| = \frac{\hbar}{p}\left|\frac{\partial U}{\partial x}\frac{1}{2(E-U)}\right| = \lambda\frac{|F|}{2|E-U|} \ll 1, \tag{15.27}$$

где сила $F = -\partial U/\partial x$. Вблизи точек поворота, где $p \to 0$, $E \approx U$, движение не квазиклассично. Резкое изменение потенциала, как, например, около непроницаемой стенки, соответствует очень малому или исчезающему значению R, что также нарушает условие квазиклассичности.

15.3 Асимптотическое разложение

При формальном *предельном переходе* $\hbar \to 0$, когда постоянная Планка стремится к нулю, любой потенциал без разрывов (так что $R \neq 0$) удовлетворяет нашим условиям квазиклассичности, и можно ожидать, что мы придём к классическим результатам. Однако переход к классической механике, похожий на переход от волновой оптики к геометрической, довольно своеобразен. Волновая функция ψ не имеет прямого классического аналога. Она *неаналитична*, как функция $\hbar$ при $\hbar \to 0$. *Фаза* волновой функции действительно стремится к классическому действию (15.5) при заданной энергии, но $S \gg \hbar$ и ψ безудержно осциллирует при этом. Поэтому регу-

лярный подход к квантовым поправкам заключается в разложении *фазы* по степеням $\hbar$.

Будем искать волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{(i/\hbar)\varphi(x)}, \quad \varphi = S + \frac{\hbar}{i}\ln A. \tag{15.28}$$

Фаза φ может быть представлена в виде степенного ряда

$$\varphi = S_0 + \hbar S_1 + \frac{\hbar^2}{2}S_2 + \dots . \tag{15.29}$$

Подставим это разложение в уравнении Шрёдингера (9.4) и выделим члены с одинаковыми степенями $\hbar$:

$$\frac{S_0'^2}{2m} + U - E = 0, \quad S_0' = \pm p, \quad S_0 = \pm\int^x p\,dx; \tag{15.30}$$

$$S_0'S_1' - \frac{i}{2}S_0'' = 0, \quad S_1 = \frac{i}{2}\ln\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right); \tag{15.31}$$

$$S_0'S_2' + S_1^2 - iS_1'' = 0, \quad S_2 = \frac{m}{2p^3}\frac{\partial U}{\partial x} - \int^x dx\,\frac{m^2}{4p^5}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)^2. \tag{15.32}$$

Результаты (15.30) и (15.31) совпадают с найденным ранее (15.19), (15.20); S_1 определяет амплитуду A.

В поправочном члене S_2 (уравнения (15.32)) оба слагаемых одного порядка, и в квазиклассической ситуации (15.23) эта добавка мала: $\hbar S_2 \ll 1$. Тем не менее ряд (15.29) является *асимптотическим*. Для любого числа N членов этого ряда существует такое малое значение $\hbar$, что разница

$$\Delta_N(\hbar) = \left| S - \sum_{n=0}^{N}\frac{\hbar^n}{n!}S_n \right| \tag{15.33}$$

будет меньше, чем любая малая заданная величина. Но для *фиксированного* реального значения $\hbar$ и достаточно больших N разность Δ_N начинает расти. Если мы находимся в квазиклассической области (15.23), первые члены ряда дают хорошее приближение, и ошибка аппроксимации имеет порядок первого отброшенного члена.

15.4 Стационарная фаза

Предполагая, что решения типа (15.6) обеспечивают хорошее приближение, построим волновой пакет из таких решений, имеющих одинаковое направление распространения и энергии, сосредоточенные вблизи центроида E_0,

$$\Psi(x,t) = \int_{E\sim E_0} \frac{dE}{\sqrt{p(x;E)}}\, e^{(i/\hbar)[S(x;E)-Et]}. \tag{15.34}$$

Этот пакет обладает почти классическими свойствами. Действительно, фаза компонентов пакета,

$$\varphi(x,t;E) = S(x;E) - Et, \tag{15.35}$$

не что иное, как классическое действие для частицы с энергией E, так как он удовлетворяет уравнению (7.63),

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -E, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{\partial S}{\partial x} = \pm p(x), \tag{15.36}$$

в то время как дополнительный квантовый потенциал в (7.62) мал в этих условиях. С такой точностью имеем уравнение Гамильтона — Якоби для фазы (15.35),

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 + U(x). \tag{15.37}$$

Мы ожидаем, что квазиклассическое приближение будет хорошо работать в пределе коротких длин волн (высокие энергии). При этом различные компоненты пакета (15.34) быстро осциллируют и стремительно меняются от одного компонента к другому. Это приводит, вообще говоря, к сильному сокращению различных вкладов в подынтегральную функцию. Исключительная ситуация соответствует области *стационарной фазы*, где соседние компоненты складываются *в фазе*. Это происходит, когда

$$\frac{\partial\varphi}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial E} - t = 0. \tag{15.38}$$

Уравнение (15.38) определяет движение центра тяжести пакета.

Чтобы убедиться, что движение в этом приближении действительно классическое, достаточно явно вывести уравнение движения, которое следует

из (15.38):

$$t = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E}\int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{2m[E - U(x')]} = \\ = \int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{\frac{m}{2[E - U(x')]}} = \int_{x_0}^{x} \frac{dx'}{v(x')}. \tag{15.39}$$

Здесь $v(x)$ — это скорость вдоль классической траектории, и мы выбрали начало отсчёта времени в точке $x = x_0$, так что (15.39) определяет классическую траекторию $x(t)$ с начальным условием $x(0) = x_0$. Квантовые флуктуации и квантовое расплывание волнового пакета содержатся в *более высоких* членах разложения (15.29). Таким образом, с математической точки зрения квазиклассическое приближение является разновидностью *метода стационарной фазы* [47]. С точки зрения континуального интеграла (разделы 7.11–7.13) виртуальные траектории интерферируют и, *в квазиклассической ситуации*, компенсируют друг друга, так что только область стационарной фазы выживает, а это обеспечивает доминирование классической траектории и малость квантовых поправок. В общем случае нужно тщательно учитывать все виртуальные траектории.

15.5 Условия сшивки

Так как потенциал наиболее общего вида (рис. 15.1) включает в себя не только классически разрешённые области, нам нужно также решение в запрещённой области под барьером, $U(x) > E$. С тем же разложением (15.29) достаточно рассмотреть импульс как мнимую величину, $p(x) = i|p(x)| \equiv i\hbar\kappa(x)$. Это приводит к квазиклассическому решению

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\left(Ce^{-\int^x dx\,\kappa(x)} + De^{\int^x dx\,\kappa(x)}\right) e^{-(i/\hbar)Et}. \tag{15.40}$$

Имея в наличии области обоих типов, разрешённые и запрещённые, как (ab) и (bc) на рис. 15.1, мы должны согласовать коэффициенты волновой функции по обе стороны от точки поворота. Как мы помним из простейших примеров гл. 2, это в действительности и есть основная часть решения. Ранее мы могли это сделать прямым способом непрерывной сшивки функции и её производной. Но здесь это невозможно, так как квазиклассические решения *неверны* в непосредственной близости от точки поворота из-за нефизической особенности, нарушающей неравенство (15.27) (см. задачу 15.2).

Ниже мы разработаем несколько подходов, чтобы избежать этих трудностей и выполнить корректную сшивку. Прежде всего, как мы видели в разделе 9.4, решения, найденные в разных частях пространства, связаны из-за инвариантности относительно обращения времени и сохранения тока. Здесь можно получить аналог переходной матрицы (9.37) для связи решений через точку поворота. Используя квазиклассические выражения (15.6) и (15.40), получаем из сохранения тока

$$|A|^2 - |B|^2 = 2\,\mathrm{Im}(C^* D) \tag{15.41}$$

вместо полученного ранее уравнения (9.41). Теперь амплитуды C и D должны быть выражены через матрицу перехода (9.40):

$$|A|^2 - |B|^2 = 2\,\mathrm{Im}(\alpha^* \beta)(|A|^2 - |B|^2), \tag{15.42}$$

что в конечном итоге приводит к

$$\mathrm{Im}(\alpha^* \beta) = \frac{1}{2}. \tag{15.43}$$

Однако этого всё ещё недостаточно для полного определения амплитуд.

Рассмотрим простейший способ нахождения условий сшивки, который работает в окрестности изолированной точки поворота для потенциала $U(x)$, регулярного в этой окрестности. Так как в точке поворота, скажем, при $x = 0$, имеем $U(0) = E$, то вблизи этой точки потенциал можно представить в линейном приближении как

$$U(x) \approx E + x\left(\frac{dU}{dx}\right)_{x=0} \equiv E - F_0 x. \tag{15.44}$$

Таким образом, в этой области мы сводим нашу задачу к точно решаемой задаче для однородного поля, решение которой не сингулярно в точке поворота и имеет асимптотику, найденную в разделе 9.9. Заметим, что асимптотика функции Эйри имеет как раз нужный нам квазиклассический характер. Следовательно, наша программа выглядит так: найти точное решение в окрестности (15.44) через функцию Эйри, а затем склеить его непрерывно с квазиклассическими асимптотиками с обеих сторон.

Задача 15.2

Используя метод фазовых интегралов задачи 15.1, показать, что точное решение не имеет особенности в точке поворота [93].

Решение.

С использованием (15.11) получаем, что в классически разрешённой области, например, справа от точки поворота, $x \geqslant 0$,

$$A(x) = -\frac{C}{\sqrt{k(x)}}\, W(x) e^{i\vartheta(x)}, \quad B(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}}\, W(x) e^{-i\vartheta(x)}, \tag{15.45}$$

где C является константой, а

$$W(x) = \exp\Big\{2\int_0^x dx'\, f(x') \sin^2[S(x') + \vartheta(x')]\Big\}. \tag{15.46}$$

В этой области волновая функция и ее производная имеют вид

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{C}{k(x)}\, W(x) \sin[S(x) + \vartheta(x)], \\ \psi'(x) &= CW(x) \cos[S(x) + \vartheta(x)]. \end{aligned} \tag{15.47}$$

Теперь рассмотрим $x \to 0$, когда

$$k(x) = a\sqrt{x}, \quad S(x) = \frac{2a}{3}\, x^{3/2}, \quad f(x) = \frac{1}{4x}. \tag{15.48}$$

Тогда фаза $\vartheta(x)$ удовлетворяет с точностью до членов $\sim \sqrt{x}$

$$\vartheta'(x) = f(x) \sin[2\vartheta(x)] \tag{15.49}$$

и эта часть полной фазы (15.47) является более важной, чем квазиклассическое действие $S(x)$. Следовательно, в непосредственной близости около $x \to 0$

$$\tan[\vartheta(x)] = \mathrm{const}\, k(x) \propto \sqrt{x}. \tag{15.50}$$

Слабым местом в нашей программе сшивки является вопрос существования области перекрытия, где квазиклассическое решение уже применимо, а разложение (15.44) тоже ещё остается в силе. Нам нужна область $x \approx \bar{x}$ такая, что потенциал ещё линейный, $\bar{x} \ll R$, где R — типичный масштаб изменения потенциала, и в то же время $(d\lambda/dx)_{x=\bar{x}} \ll 1$ (уравнение (15.24)).

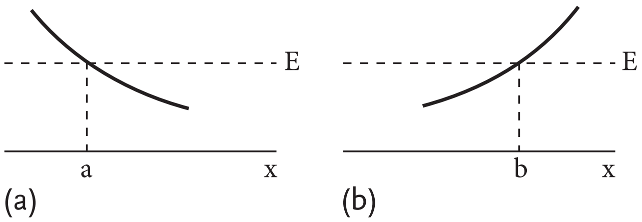

Рис. 15.3: Два случая для потенциала вблизи точки поворота

Типичным импульсом в области (15.44) является

$$p = \sqrt{2mF_0x} \sim \sqrt{\frac{2mxU(x=0)}{R}} \sim \sqrt{\frac{2mEx}{R}} \equiv p_0\sqrt{\frac{x}{R}}. \tag{15.51}$$

Это соответствует длине волны

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} \sim \frac{\hbar}{p_0}\sqrt{\frac{R}{x}}, \quad \frac{d\lambda}{dx} \sim \frac{\hbar}{p_0}\sqrt{\frac{R}{x^3}}, \tag{15.52}$$

и квазиклассическое условие (15.24) принимает вид

$$x^{3/2} \gg \sqrt{R}\,\frac{\hbar}{p_0} \quad \rightsquigarrow \quad x \gg R^{1/3}\left(\frac{\hbar}{p_0}\right)^{2/3} = R\left(\frac{\hbar}{p_0R}\right)^{2/3}. \tag{15.53}$$

Благодаря главному условию (15.23), $(\hbar/p_0R) \ll 1$, видим, что можно выбрать окрестность $x \sim \bar{x}$, в которой удовлетворяется двойное неравенство

$$R\left(\frac{\hbar}{p_0R}\right)^{2/3} \ll \bar{x} \ll R. \tag{15.54}$$

Тогда мы можем провести сшивку в точке $x = \bar{x}$.

Задача 15.3

Выполните сшивку функции Эйри (раздел 9.9) с квазиклассическими решениями по обе стороны от точки поворота. Выразите результат через матрицу перехода (9.40) и покажите, что параметры α и β равны

$$\alpha = \frac{1}{2}\,e^{-i\pi/4}, \quad \beta = e^{i\pi/4}, \tag{15.55}$$

в соответствии с формулой (15.43).

Согласно последней задаче формулы сшивки для точки поворота типа изображённой на рис. 15.3b, когда запрещенная область находится справа от классической области, имеют вид

$$A = e^{i\pi/4}\, C + \frac{1}{2}\, e^{-i\pi/4}\, D, \quad B = e^{-i\pi/4}\, C + \frac{1}{2}\, e^{i\pi/4}\, D. \tag{15.56}$$

Вблизи точки поворота типа изображённой на рис. 15.3a, когда барьер расположен слева от классической области, можно поступить таким же образом, и ответ может быть получен из (15.56) заменой $A \Leftrightarrow B$, $C \Leftrightarrow D$. Теперь можно явно сформулировать *правила связи* для различных возможных ситуаций.

I. *Точка поворота типа* рис. 15.3b.

(i) Дано, что при $x > b$ волновая функция убывает ($D = 0, C = 1$). Правило соответствия между решениями с двух сторон от точки $x = b$ имеет вид

$$\frac{2}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_x^b dx\, \frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) \quad \Longleftarrow\!\!\rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_b^x dx\, \frac{|p|}{\hbar}\right). \tag{15.57}$$

(ii) Дано, что при $x > b$ волновая функция растёт ($C = 0$, $D = 1$):

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_x^b dx\, \frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) \quad \leftarrow\!\!\Longrightarrow \quad -\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_b^x dx\, \frac{|p|}{\hbar}\right). \tag{15.58}$$

II. *Точка поворота типа* рис. 15.3a.

(i) Дано, что при $x < a$ волновая функция убывает:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_x^a dx\, \frac{|p|}{\hbar}\right) \quad \leftarrow\!\!\Longrightarrow \quad \frac{2}{\sqrt{|p|}} \cos\left(\int_a^x dx\, \frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{15.59}$$

(ii) Дано, что при $x < a$ волновая функция растёт:

$$-\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_x^a dx\, \frac{|p|}{\hbar}\right) \quad \Longleftarrow\!\!\rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_a^x dx\, \frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{15.60}$$

Вообще говоря, эти формулы сшивки можно уверенно использовать только в одном направлении, а именно в направлении, которое указано двойными стрелками. В самом деле, предположим, что в уравнении (15.57) мы продолжили решение слева направо и в области $x < b$ совершили небольшую ошибку в фазе. Это эквивалентно небольшой примеси синуса из урав-

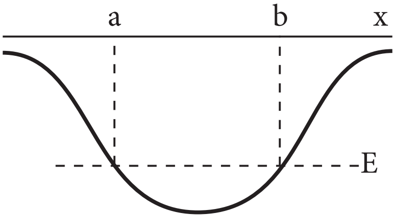

Рис. 15.4: Иллюстрация к выводу квазиклассического правила квантования

нения (15.58) к левой части (15.57). При дальнейшем продолжении, эта примесь приводит, в соответствии с (15.58), к *растущей* экспоненте. Каким бы малым ни был коэффициент перед этой растущей экспонентой, она превысит основную (падающую) экспоненту на достаточном расстоянии от точки поворота. Это означает, что гарантировано только продолжение в направлении растущей вещественной экспоненты.

15.6 Квантование Бора — Зоммерфельда

В качестве приложения наших общих результатов выведем правило квантования Бора — Зоммерфельда, которое раньше использовалось без серьезного обоснования, в частности, в упрощенной форме для атома водорода (раздел 1.6) и для частицы в магнитном поле (раздел 13.7).

Мы ищем энергетический спектр связанных состояний в квазиклассическом потенциале (рис. 15.4). Для связанного состояния в подбарьерных областях $x < a$ и $x > b$ волновая функция должна иметь только экспоненциально затухающее поведение. Под левым барьером

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_x^a dx\, \frac{|p|}{\hbar}\right), \quad x < a. \tag{15.61}$$

Согласно (15.59) внутри потенциальной ямы имеем квазиклассическое решение

$$\psi(x) = \frac{2c}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_a^x dx\, \frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right), \quad a < x < b. \tag{15.62}$$

Это решение должно быть продолжено в область $x > b$. Для удобства перепишем (15.62), изменяя начало отсчёта фазы:

$$\psi(x) = \frac{2c}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_a^b dx\, \frac{p}{\hbar} - \int_x^b dx\, \frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{15.63}$$

или используя простую тригонометрию,

$$\psi(x) = \frac{2c}{\sqrt{p}} \left\{ -\cos\Big([a,b]\Big) \sin\left(\int_x^b dx\,\frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) + \right. \\ \left. + \sin\Big([a,b]\Big) \cos\left(\int_x^b dx\,\frac{p}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) \right\}, \tag{15.64}$$

где фазовый интеграл по разрешенной области обозначается как

$$[a,b] \equiv \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx\, p(x). \tag{15.65}$$

Как следует из (15.57) и (15.58), первое слагаемое в (15.64) после продолжения под барьером, $x > b$, порождает неправильную растущую экспоненту, тогда как второе слагаемое генерирует правильную падающую экспоненту. Связанное состояние существует, если коэффициент при первом члене точно равен нулю; в этом случае применение формулы (15.57) в направлении тонкой стрелки является безопасным. Таким образом, появляется следующее *условие квантования*, которое определяет дискретный энергетический спектр:

$$\cos\Big([a,b]\Big) = \cos\left(\int_a^b dx\,\frac{p(x;E)}{\hbar}\right) = 0. \tag{15.66}$$

Это эквивалентно стандартному правилу Бора-Зоммерфельда

$$\int_a^b dx\, p(x;E) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\hbar, \quad n = 0, 1, 2 \ldots. \tag{15.67}$$

Нужно помнить, что энергия E входит не только явно в определение (15.1) импульса $p(x;E)$, но и через пределы интегрирования: $E = U(a) = U(b)$.

Как обсуждалось качественно в главе 1, квазиклассически квантованной величиной является фазовый интеграл (адиабатический инвариант), равный классическому действию за период движения,

$$S = \oint p dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{15.68}$$

Строго говоря, квазиклассическое квантование может быть использовано только для $S \gg \hbar$, т. е. для больших квантовых чисел $n \gg 1$. Тем не менее, как правило, (15.68) можно экстраполировать до основного состояния

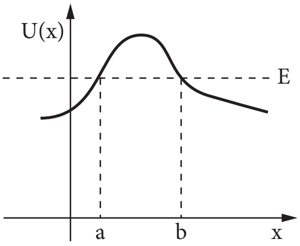

Рис. 15.5: Проникновение через барьер

$n \sim 1$ для качественных оценок. Полученный результат будет точным для всех состояний гармонического осциллятора (сравните уравнения (1.17) и (11.15)), а также может дать хорошее приближение для энергетического спектра и для других подобных потенциалов.

Разница квазиклассического результата (15.67), (15.68), по сравнению с первоначальным постулатом Бора (1.13), состоит в наличии *энергии нулевых колебаний*, что даётся дополнительным членом 1/2. У нас есть полное право оставить этот член: хотя он мал по сравнению с n в типичной квазиклассической области $n \gg 1$, этот член оставлен корректно, поскольку он, как поправка *первого порядка*, велик по сравнению с ранее отброшенными членами *второго порядка* (15.21) или (15.29). Внутри ямы имеем следующее количество переменных длин волн:

$$\frac{1}{2\pi}\int_a^b k\,dx = \frac{1}{2}n + \frac{1}{4}. \tag{15.69}$$

Для основного состояния (если бы квазиклассическое приближение было применимо для $n = 0$) мы имели бы внутри ямы не $\lambda/2$, как в случае глубокой ямы (раздел 3.1), а только $\lambda/4$. Оставшаяся часть от половины длины волны приходится на подбарьерные хвосты волновой функции. Тем не менее, как и в бесконечной яме, каждое следующее состояние отвечает добавке $\lambda/2$. Таким образом, n даёт число узлов волновой функции внутри ямы, в соответствии с осцилляционной теоремой (раздел 11.1). Площадь фазового пространства между двумя соседними квазиклассическими связанными состояниями составляет $2\pi\hbar = h$ (рис. 1.4). Мы использовали это обстоятельство в задаче с магнитным полем (раздел 13.7), где оно было связано с квантованием магнитного потока, а также при подсчете плотности уровней в разделах 3.8 и 3.9.

Задача 15.4

Примените правила сшивки к проблеме проникновения через барьер, (рис. 15.5), и получите коэффициент прохождения (2.59).

Стандартное выражение (2.59) справедливо, если точки поворота a и b находятся далеко друг от друга, так что между этими точками существует область под барьером, достаточно удаленная от a и b, чтобы можно было использовать квазиклассическое приближение для волновой функции. В этом случае $\int_a^b \kappa\, dx \gg 1$, и коэффициент прохождения мал, $T \ll 1$. Если это не так и $T \sim 1$, нужны более мощные методы, учитывающие одновременно обе точки поворота, а не каждую из них по отдельности. Такая ситуация имеет место, например, если энергия E близка к вершине барьера, и точки поворота сближаются, ликвидируя квазиклассическую область между ними. Более продвинутая методика будет вкратце рассмотрена, начиная с раздела 15.8.

15.7 Квазиклассические матричные элементы

При $n \gg 1$ квазиклассические волновые функции быстро осциллируют в классически разрешённой области (рис. 15.2). Такое поведение позволяет упростить приближённые вычисления физических величин.

Сначала нормируем волновую функцию связанного состояния, для чего надо вычислить $\int dx\, |\psi(x)|^2$. Под барьером волновая функция быстро падает, так как квазиклассическая длина проникновения мала, $l \sim 1/\kappa \approx \approx \lambda/4 \ll R$. Поэтому сохраним только классически разрешённую область в нормировочном интеграле

$$I = \int_a^b dx \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_a^x k\, dx - \frac{\pi}{4} \right) \right]^2 . \qquad (15.70)$$

При $n \gg 1$ квадрат быстро осциллирующего косинуса можно заменить на его среднее значение $1/2$. После этого интеграл легко выразить в терминах классического периода движения T или частоты $\omega = 2\pi/T$ для заданной энергии:

$$I \approx \int_a^b \frac{dx}{2p} = \frac{1}{2m} \int_a^b \frac{dx}{v} = \frac{1}{2m} \int_{t(a)}^{t(b)} dt = \frac{1}{2m}\,\frac{T}{2} = \frac{\pi}{2m\omega}. \qquad (15.71)$$

Таким образом, нормированную волновую функцию n-го связанного состоянию можно приближённо записать в виде

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2m\omega_n}{\pi p_n}} \cos\left(\int_{a_n}^x k_n\, dx - \frac{\pi}{4} \right) \equiv \sqrt{\frac{2m\omega_n}{\pi p_n}} \cos \varphi_n(x). \qquad (15.72)$$

Вычисляя интеграл перекрытия $\int dx\psi_m\psi_n$, можно увидеть, что различные квазиклассические функции, $m \neq n$, взаимно ортогональны, если игнорировать экспоненциально малые вклады подбарьерных хвостов и быстро осциллирующие слагаемые. Рассмотрим более общую величину, а именно матричный элемент произвольного оператора $\hat{Q}$, зависящего от координаты или импульса частицы,

$$Q_{nm} = \int dx\, \psi^* \hat{Q} \psi_m \approx \frac{2m}{\pi} \sqrt{\omega_n \omega_m} \int dx\, \frac{\cos\varphi_n(x)}{\sqrt{p_n}}\, \hat{Q}\, \frac{\cos\varphi_m(x)}{\sqrt{p_m}}. \quad (15.73)$$

Здесь мы воспользовались приближённым квазиклассическим выражением (15.72). Если, например, $\hat{Q} = Q(x)$, будем иметь

$$\begin{aligned} Q_{nm} =& \frac{m}{\pi} \sqrt{\omega_n \omega_m} \int dx\, \frac{Q(x)}{\sqrt{p_n p_m}} \Big\{ \cos[\varphi_n(x) - \varphi_m(x)] + \\ & + \cos[\varphi_n(x) + \varphi_m(x)] \Big\}. \end{aligned} \quad (15.74)$$

Если обе фазы велики, как это и предполагается в случае квазиклассической области, второй косинус в (15.74) осциллирует очень быстро, так что интеграл от его произведения на гладкую функцию исчезающе мал, и так же, как и раньше, можно пренебречь этим слагаемым.

Дальнейший расчёт мы выполним для практически важного случая близких уровней, когда $n \gg 1$, $m \gg 1$ (квазиклассическая область), но их разность относительно невелика, $|n - m|/n \ll 1$. (Более общий случай рассматривается в [94] § 51.) В такой ситуации мы можем положить $n = m$ во всех гладких множителях ($\omega_n \approx \omega_m = \omega$, $p_n \approx p_m = p$):

$$Q_{nm} \approx \frac{m\omega}{\pi} \int dx\, \frac{dx}{p(x)} \cos[\varphi_n(x) - \varphi_m(x)]. \quad (15.75)$$

Разность фаз двух близких состояний,

$$\varphi_n(x) - \varphi_m(x) = \frac{1}{\hbar} \left(\int_{a_n}^{x} dx\, p_n(x) - \int_{a_m}^{x} dx\, p_m(x) \right), \quad (15.76)$$

можно представить как

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) - \varphi_m(x) \approx& \frac{1}{\hbar} \Bigg\{ (a_n - a_m) \frac{\partial}{\partial a_n} \int_{a_n}^{x} p_n\, dx + \\ & + (n - m) \int_{a_n}^{x} dx\, \frac{\partial p_n}{\partial n} \Bigg\}. \end{aligned} \quad (15.77)$$

Производная в первом члене в фигурных скобках (15.77) равна подынтегральной функции на нижнем пределе, и поэтому исчезает, $p_n(a_n) = 0$, а второе слагаемое может быть выражено по формулам (1.57)–(1.62). Поэтому находим

$$\varphi_n(x) - \varphi_m(x) \approx \omega_n(n - m)t_n(x), \tag{15.78}$$

что выражает разность фаз через разницу во времени движения по двум близким классическим траекториям. Это позволяет получить матричный элемент (15.75) в форме

$$Q_{nm} = \frac{\omega}{\pi} \int_{a_n}^{b_n} \frac{dx}{v_n(x)}\, Q(x) \cos[(n - m)\omega_n t_n(x)], \tag{15.79}$$

где в нашем приближении интеграл покрывает классическую область движения. Переходя к интегрированию по времени вдоль классической траектории, $dx/v = dt$, получаем

$$Q_{nm} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} dt\, Q(x(t)) \cos\Big(\frac{2\pi(n - m)t}{T}\Big). \tag{15.80}$$

В квазиклассическом пределе матричный элемент оператора $\hat{Q}(x)$ между близкими дискретными состояниями, которые отличаются по энергии на $\hbar\omega$, становится *Фурье-компонентой* по частоте ω величины $Q(x(t))$, как функции времени вдоль соответствующей классической траектории (сравните с точным результатом (7.9)).

Задача 15.5

Покажите, что квазиклассический матричный элемент зависящего от импульса оператора $Q(\hat{p})$ между близкими состояниями представляет собой Фурье-компоненту классической функции $Q(p(t))$, где $p(t)$ является классическим импульсом на соответствующей траектории.

Решение.

Замените импульс на дифференциальный оператор $(-i\hbar\partial/\partial x)$ и используйте тот факт, что при действии этого оператора на квазиклассическую волновую функцию следует дифференцировать только быстро меняющуюся фазу, пренебрегая производной гладкой функции $1/\sqrt{p}$.

15.8 Решения в комплексной плоскости*

В разделе 15.5 мы сформулировали проблему сшивки квазиклассических решений одномерного уравнения Шрёдингера, найденных по разные стороны точки поворота. Для изолированной точки поворота проблема была решена с помощью продолжения в обоих направлениях точного решения, справедливого около точки поворота. Здесь мы рассмотрим идею более общего подхода, который можно будет распространить на проблему с несколькими близкими точками поворота [95]. Подход основан на *аналитическом продолжении* волновой функции из одной области в другую через *комплексную плоскость*, при этом избегая опасную область на вещественной оси, где квазиклассическое приближение несправедливо.

Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$\psi'' + u(z)\psi = 0 \tag{15.81}$$

в комплексной плоскости переменной z. Здесь $u(z)$ является аналитическим продолжением с вещественной оси функции

$$u(x) = k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]. \tag{15.82}$$

Будем считать, что точка поворота находится в начале координат $z = 0$, т. е. $u(0) = 0$, и что далеко от начала координат для потенциала U оправдан квазиклассический подход. Два линейно независимых приближения (15.6) к точному решению заслуживают особых обозначений:

$$(0, z) \equiv u^{-1/4} \exp\left(i\int_0^z \sqrt{u}\,dz\right)[1 + O(\hbar)], \tag{15.83}$$

$$(z, 0) \equiv u^{-1/4} \exp\left(-i\int_0^z \sqrt{u}\,dz\right)[1 + O(\hbar)]. \tag{15.84}$$

В непосредственной близости от *изолированной* точки поворота, как правило, можно использовать для $u(z)$ разложение (15.44), которое начинается с линейного члена, $u(z) \approx \bar{c}z$. Для определённости будем считать, что $\bar{c} > 0$; это соответствует случаю на рис. 15.3а. Мы уже показали (15.54), что такое разложение справедливо в области, которая перекрывается с областью действия квазиклассического приближения, если $kR \gg 1$. В такой окрестности

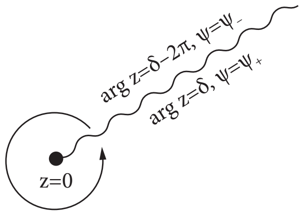

Рис. 15.6: Пересечение разреза

наши функции принимают форму

$$(0,z) \propto z^{-1/4}\, e^{icz^{3/2}}, \quad (z,0) \propto z^{-1/4}\, e^{-icz^{3/2}}, \tag{15.85}$$

где новая константа $c = (2/3)\sqrt{c}$ по-прежнему положительна. Можно вспомнить, что мы уже встречались с такими выражениями при рассмотрении функции Эйри в задаче об однородном поле (разделы 9.8 и 9.9).

Из-за дробных степеней точка поворота $z = 0$ является *точкой ветвления*, и мы должны сделать разрез от этой точки, чтобы выбрать ветвь функции. Точное решение уравнения Шрёдингера (15.81) не имеет особенности в $z = 0$ — решение представляет собой однозначную аналитическую функцию. Особенность появляется только в квазиклассическом представлении решения, которое несправедливо около $z = 0$. Это определяет правило пересечения разреза: так как аналитическая функция не имеет скачков, это пересечение означает лишь изменение аргумента на 2π (рис. 15.6).

Возьмём в качестве разреза луч, нижний берег которого соответствует $\arg z = \delta$, а верхний берег — $\arg z = \delta - 2\pi$ (положительным направлением считается направление против часовой стрелки); соответственно, выражения для волновых функций снабдим индексами $\pm$. Возьмём на нижнем $(+)$ берегу, $z = |z| \exp(i\delta)$, первую функцию (15.85) в качестве нашего решения,

$$(0,z)_+ \sim |z|^{-1/4}\, e^{-i\delta/4} \exp\Big[ic|z|^{3/2}\, e^{i(3/2)\delta}\Big]. \tag{15.86}$$

Перемещаясь вокруг точки поворота назад, не выходя из квазиклассической области, будем иметь на верхнем $(-)$ берегу, $z = |z| \exp(i\delta - 2\pi i)$,

$$(0,z)_- \sim |z|^{-1/4}\, e^{-i(\delta/4)+i\pi/2} \exp\Big[ic|z|^{3/2} e^{i(3/2)(\delta-2\pi)}\Big], \tag{15.87}$$

или

$$(0,z)_- \sim i|z|^{-1/4}\, e^{-i\delta/4} \exp\Big[-ic|z|^{3/2} e^{i(3/2)\delta}\Big]. \tag{15.88}$$

С другой стороны, второе решение (15.85) на нижнем берегу разреза имеет вид

$$(z,0)_+ \sim |z|^{-1/4}e^{-i\delta/4}\exp\Big[-ic|z|^{3/2}e^{i(3/2)\delta}\Big] = -i(0,z)_-. \tag{15.89}$$

Таким образом, при пересечении разреза против часовой стрелки форма решения меняется:

$$(z,0) \to -i(0,z), \tag{15.90}$$

и аналогично

$$(0,z) \to -i(z,0). \tag{15.91}$$

Двигаясь по часовой стрелке, мы получим результаты (15.90) и (15.91) с заменой $(-i) \to i$.

Рецепты (15.90) и (15.91) показывают, что комплексная плоскость содержит секторы с различным поведением решений в зависимости от фазы

$$\varphi(z) = \int_0^z \sqrt{u}\,dz. \tag{15.92}$$

Если фаза $\varphi(z)$ действительна, волновая функция $\propto \exp(i\varphi)$ осциллирует. Это аналог классически разрешённой области, где оба решения имеют один и тот же порядок величины. Назовём линии действительной фазы *линиями уровня*. Линии, на которых фаза $\varphi(z)$ чисто мнимая, называются *линиями Стокса*; здесь одно из решений экспоненциально растёт, когда мы отходим от точки поворота $z = 0$, а другое падает (аналог классически запрещенной области). Линии уровней иногда называются *сопряжёнными линиями Стокса*.

Используя явное выражение (15.85), находим линии уровня,

$$\operatorname{Im} z^{3/2} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \arg z = 0, \pm\frac{2\pi}{3}, \tag{15.93}$$

и линии Стокса,

$$\operatorname{Re} z^{3/2} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \arg z = \pm\frac{\pi}{3}, \pi. \tag{15.94}$$

Семь линий начинаются (рис. 15.7) в точке поворота: три сплошные линии уровня (15.93), три пунктирные линии Стокса (15.94) и волнистая

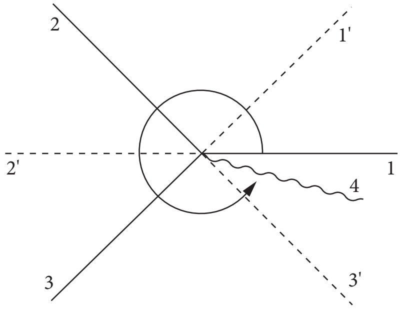

Рис. 15.7: Геометрия комплексной плоскости

линия разреза, верхний берег которого объединяется с линией уровня *1*, совпадающей с вещественной осью. При пересечении линии уровня, где оба решения осциллируют, вид решения не меняется, но мнимая часть фазы проходит через нуль и меняет знак. В результате возрастающая функция становится убывающей, и наоборот. На линии Стокса вещественная часть фазы обращается в нуль и различие в решениях максимально. На разрезе свойство возрастания или убывания сохраняется, в то время как форма решения меняется.

15.9 Обход в комплексной плоскости*

Если квазиклассическое приближение справедливо, общее решение уравнения Шрёдингера (15.81) даётся суперпозицией

$$\psi(z) = A(0, z) + B(z, 0). \tag{15.95}$$

Как видно из (15.85), в случае $c > 0$ решение $(0, z)$ убывает в секторе *1—2*, в то время как решение $(z, 0)$ возрастает. Если амплитуда B растущей функции не обращается в нуль, мы не имеем права сохранять на линии Стокса *1'* убывающий член $A(0, z)$, так как он экспоненциально мал по сравнению с уже отброшенными поправками порядка $\hbar$ к главному (возрастающему) члену. Однако на линии уровня *2* оба решения осциллируют, так что в непосредственной близости от линии *2* член $(0, z)$ снова должен быть учтён. Поскольку в рамках квазиклассического приближению мы не можем проследить этот член по всему сектору *1—2*, в общем случае мы не знаем, какова должна быть амплитуда члена $(0, z)$ по прибытии на линию *2*. В то же время член $(z, 0)$ доминирует во всем секторе и, следовательно, он должен быть просто продолжен с *1* к *2* с той же амплитудой B. Оказы-

вается, что коэффициент перед решением $(0, z)$ действительно меняется после пересечения сектора *1—2* — так называемое *явление Стокса*.

Ключ к полному решению проблемы сшивки может быть найден при обходе через всю комплексную плоскость (рис. 15.7). Обход должен совершаться так, чтобы всегда при этом оставаться в области применимости квазиклассического приближения. Начнём с решения на линии уровня *1*,

$$\psi = A_1\,(0, z) + B_1\,(z, 0). \tag{15.96}$$

Обходим точку поворота и по прибытии на линию *2* имеем

$$\psi = A_2\,(0, z) + B_2\,(z, 0). \tag{15.97}$$

Решение $(z, 0)$ растёт в секторе *1—2* и, следовательно, непрерывно проходит через весь сектор, $B_2 = B_1$. Если бы растущая часть решения отсутствовала ($B_1 = 0$), решение (15.96) содержала бы только часть $A_1\,(0, z)$ и мы могли бы продолжить эту часть до прямой *2*, приходя туда с $A_2 = A_1$. В присутствии большой экспоненты это уже не так, и амплитуда $(0, z)$ части решения будет другой. Запишем ее в виде

$$A_2 = A_1 + \xi\,B_1, \tag{15.98}$$

где введена неизвестная *константа Стокса* ξ.

В секторе *2—3*, функция $(0, z)$ растёт, и мы приходим на линию *3* с решением

$$\psi = A_3\,(0, z) + B_3(z, 0), \quad A_3 = A_2, \quad B_3 = B_2 + \eta\,A_2, \tag{15.99}$$

где η — новая константа. Наконец, мы приходим к линии *4* (нижний край разреза) с третьей константой,

$$\psi = A_4\,(0, z) + B_4(z, 0), \quad B_4 = B_3, \quad A_4 = A_3 + \zeta\,B_3. \tag{15.100}$$

Используя правила (15.90) и (15.91), перенесём это решение на верхний край:

$$\psi = -iA_4\,(z, 0) - iB_4\,(0, z). \tag{15.101}$$

Из-за аналитичности решения результат (15.101), полученный на прямой *1* после полного оборота, должен совпасть с первоначальным решением

(15.96). Поскольку решения $(0, z)$ и $(z, 0)$ линейно независимы, находим

$$B_4 = iA_1, \quad A_4 = iB_1 \tag{15.102}$$

или, используя промежуточные результаты (15.98—15.100),

$$B_1(1+\xi\eta) + \eta A_1 = iA_1, \quad A_1(1+\zeta\eta) + B_1(\xi+\zeta+\xi\eta\zeta) = iB_1. \tag{15.103}$$

Уравнение (15.103) должно выполняться для любой начальной суперпозиции (15.96), т.е. для произвольных A_1 и B_1. Это полностью определяет константы Стокса:

$$\xi = \eta = \zeta = i; \tag{15.104}$$

только три из четырёх уравнений, следующих из (15.103), независимы. Для обхода по часовой стрелке константы Стокса равны $-i$.

Задача 15.6

Показать, что если около точки $z = 0$ функция $u(z)$ пропорциональна z^n, то все константы Стокса равны $2i\cos[\pi/(n+2)]$; в этом случае точное решение уравнения Шредингера (15.81) в окрестности $z = 0$ может быть выражено в терминах функций Бесселя $J_{1/(n+2)}$ (раздел 9.7). В нашем случае $n = 1$.

15.10 Ещё раз о формулах сшивки*

Теперь мы можем использовать константы Стокса для получения правил связи раздела 15.5. Рассмотрим, например, случай с точкой поворота на левой стороне барьера (рис. 15.3b) и примем, что в классически запрещённой области $x > 0$ присутствует только убывающая функция. Нам нужно найти решение в классически разрешённой области $x < 0$.

Схема линий в комплексной плоскости показана на рис. 15.8. Удобно отсчитывать фазу функции $u(z)$ таким образом, что $\arg u = 0$ при $x < 0$. Положительной полуоси $x > 0$ тогда соответствует $\arg u = -\pi$, $u = |u|\exp(-i\pi)$ и $|u| = -u$, так как $u > 0$ при $x < 0$ и $u < 0$ при $x > 0$. Если $x > 0$, имеем

$$\begin{aligned}\int_0^x dx\,\sqrt{u} = \int_0^x dx\,\sqrt{|u|\exp(-i\pi)} = \\ = -i\int_0^x dx\,\sqrt{|u|} \equiv -i\Phi, \quad \Phi > 0,\end{aligned} \tag{15.105}$$

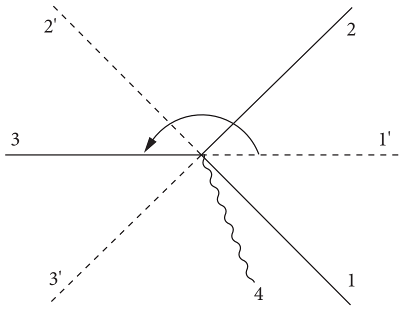

Рис. 15.8: Комплексная плоскость для вывода правил сшивки

в то время как при $x < 0$

$$\int_0^x dx\,\sqrt{u} = -i\int_x^0 dx\,\sqrt{u} \equiv -\Gamma, \quad \Gamma > 0. \tag{15.106}$$

Решения под барьером, $x > 0$, содержат

$$\exp\left(\pm i\int_0^x dx\,\sqrt{u}\right) = e^{\pm\Phi}. \tag{15.107}$$

Нужным нам решением (экспоненциально падающим) является $(x, 0)$, так как

$$(x,0) \propto \exp\left(i\int_x^0 dx\,\sqrt{u}\right) = \exp\left(-i\int_0^x dx\,\sqrt{u}\right) = e^{-\Phi}. \tag{15.108}$$

Таким образом, убывающее решение $(x, 0)$ задано на прямой *1'*, $x > 0$. Это означает, что во всём секторе *1—2* комплексной плоскости z мы имеем только падающую функцию $(z, 0)$. Обходя дальше в положительном направлении, решение начинает расти после пересечения линии уровня *2* и достигает линии уровня *3* с той же самой амплитудой, например, равной единице. Однако при дальнейшем обходе в секторе *2—3* возникает падающее решение $(0, z)$. Согласно формуле (15.108) в непосредственной близости от линии *3* решение имеет вид

$$\psi = (z,0) + (0{+}i)\,(0,z) = (z,0) + i(0,z) \quad \to \quad \psi = (x,0) + i(0,x), \tag{15.109}$$

где последнее выражение написано для вещественной оси $x < 0$. Мы установили соответствие

$$\begin{array}{ccccc} (x,0)+i(0,x) & \Leftrightarrow & \psi(x) & \Leftrightarrow & (x,0) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ x<0 & & \text{точное решение} & & x>0 \\ & & \text{около } x=0 & & \end{array} \qquad (15.110)$$

или в обозначениях (15.105) и (15.106) и с выбранными фазами

$$u^{-1/4}e^{i\Gamma} + e^{i\pi/2}u^{-1/4}e^{-i\Gamma} \Leftrightarrow (|u|e^{-i\pi})^{-1/4}e^{-\Phi}, \qquad (15.111)$$

что даёт

$$2u^{-1/4}\cos\left(\Gamma - \frac{\pi}{4}\right) \Leftrightarrow |u|^{-1/4}\, e^{-\Phi}, \qquad (15.112)$$

т. е. формулу сшивки, которая совпадает с (15.56).

15.11 Близкие точки поворота*

В этом параграфе мы рассмотрим более сложный случай двух точек поворота. Если они расположены близко друг к другу, например, близко к вершине барьера, так что квазиклассическая область между ними отсутствует, линейное приближение (15.44) не работает, и нельзя рассматривать точки поворота отдельно. Метод продолжения в комплексной плоскости пригоден и здесь, но нужно обходить обе точки так, чтобы путь проходил в квазиклассической области.

Предполагаем, что барьер имеет общий вид (рис. 15.5). Схема линий уровней в комплексной плоскости показана на рис. 15.9. Каждая точка поворота подразумевает свой разрез. Мы можем действовать аналогично тому, как это делали для одной точки поворота. Используя те же обозначения для частных решений, при $x > b$ (линия *1*) имеем

$$\psi = A_1\,(b,x) + B_1\,(x,b). \qquad (15.113)$$

В секторе *1—2*, решение (b,z) убывает, тогда как (z,b) растёт. На линию *2* приходим к

$$\psi = A_2\,(b,z) + B_2\,(z,b), \quad B_2 = B_1, \quad A_2 = A_1 + \xi_1 B_1, \qquad (15.114)$$

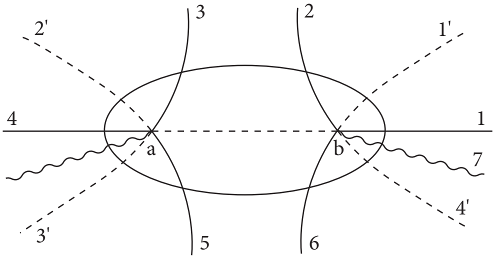

Рис. 15.9: Геометрия линий уровней и линий Стокса для случая двух близких точек поворота

где константа Стокса ξ_1 отличается от того, что было найдено в предыдущем случае.

Переходя от *2* к *3*, мы не пересекаем линии Стокса, и решение всё ещё представлено суперпозицией (15.113). Здесь удобно пересчитать фазу от точки $x = a$, поэтому запишем

$$\psi = (A_1+\xi_1 B_1)(b,z)+B_1(z,b) = (A_1+\xi_1 B_1)e^{\gamma}\,(a,z)+B_1 e^{-\gamma}\,(z,a), \quad (15.115)$$

где фазовый интеграл

$$\gamma = i\int_b^a dx\,\sqrt{u} = \int_a^b dx|p(x)| \quad (15.116)$$

есть действительное положительное число. Случай $\gamma \gg 1$ соответствует удалённым точкам поворота, когда можно обойти каждую из них по отдельности, потому что квазиклассическое приближение справедливо в области между ними. Нынешний подход работает для произвольного значения γ.

В секторе *3—4* решение (z,a) убывает, так что на линии *4*

$$\begin{aligned}\psi &= A_4\,(a,z) + B_4\,(z,a) = \\ &= (A_1 + \xi_1 B_1)e^{\gamma}\,(a,z) + [B_1 e^{-\gamma} + \eta_1 e^{\gamma}(A_1 + \xi_1 B_1)](z,a),\end{aligned} \quad (15.117)$$

где η_1 — это новая константа Стокса. Теперь мы пересекаем разрез в положительном направлении и применяем правило (15.90),

$$\psi = -iA_4\,(z,a) - iB_4\,(a,z). \quad (15.118)$$

Остальное продолжение не требует подробных объяснений,

линии 5, 6:

$$\begin{aligned}\psi &= -i(A_4 + \xi_2 B_4)(z, a) - iB_4(a, z) = \\ &= -ie^{\gamma}(A_4 + \xi_2 B_4)(z, b) - iB_4 e^{-\gamma}(b, z);\end{aligned} \tag{15.119}$$

линия 7:

$$\psi = -ie^{\gamma}(A_4 + \xi_2 B_4)(z, b) - i[e^{-\gamma} B_4 + \eta_2 e^{\gamma}(A_4 + \xi_2 B_4)](b, z); \tag{15.120}$$

линия 1:

$$\psi = -e^{\gamma}(A_4 + \xi_2 B_4)(b, x) - [e^{-\gamma} B_4 + \eta_2 e^{\gamma}(A_4 + \xi_2 B_4)](x, b). \tag{15.121}$$

Сравнение результата (15.121) с исходным выражением (15.113) даёт

$$-A_1 = e^{\gamma}(A_4 + \xi_2 B_4), \quad -B_1 = e^{\gamma}[\eta_2 A_4 + (\xi_2\eta_2 + e^{-2\gamma})B_4]. \tag{15.122}$$

Из (15.117) и (15.121) находим после простой алгебры

$$1 + \xi_2\eta_1 = -e^{-2\gamma}, \quad \xi_1 + \xi_2(\xi_1\eta_1 + e^{-2\gamma}) = 0; \tag{15.123}$$

$$\begin{aligned}&\eta_2 + \eta_1(\xi_2\eta_2 - e^{-2\gamma}) = 0, \\ &\xi_1\eta_2 + (\xi_1\eta_1 + e^{-2\gamma})(\xi_2\eta_2 + e^{-2\gamma}) = -e^{-2\gamma}.\end{aligned} \tag{15.124}$$

Только три из четырех уравнений (15.123), (15.124) являются независимыми, и общее решение можно записать в виде

$$\xi_1 = \xi_2 \equiv \xi, \quad \eta_1 = \eta_2 \equiv \eta, \quad -\xi\eta = 1 + e^{-2\gamma}. \tag{15.125}$$

Чтобы вычислить коэффициент прохождения, воспользуемся общими свойствами матрицы перехода из разделов 9.4 и 15.5. В нашем случае при $x \ll a$ имеем волны, распространяющиеся вправо (амплитуда A) и влево (амплитуда B), а при $x \gg b$ соответствующие волны имеют амплитуды C и D. Введём матрицу перехода $\widetilde{M}$ следующим образом (обратно тому, что мы использовали в (9.31)):

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{M} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \tag{15.126}$$

Задача 15.7

Используя инвариантность относительно обращения времени, преобразование тока и уравнение (15.118), показать, что в нашем случае роль коэффициентов A и B играют величины $-iB_4$ и $-iA_4$ соответственно, так что соотношение (15.126) имеет вид

$$\begin{pmatrix} B_4 \\ A_4 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{15.127}$$

где

$$\operatorname{Det} \widetilde{M} = |\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1. \tag{15.128}$$

С другой стороны, из (15.117) и (15.125) следует, что

$$\begin{pmatrix} B_4 \\ A_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta e^\gamma & -e^\gamma \\ e^\gamma & \xi e^\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \tag{15.129}$$

Следовательно, матрица перехода даётся выражением

$$\widetilde{M} = -i\, e^\gamma \begin{pmatrix} \eta & -1 \\ 1 & \xi \end{pmatrix}. \tag{15.130}$$

Условие (15.128) выполняется в силу (15.125), а константы ξ и η должны быть связаны соотношением $\xi = -\eta^*$ или с учётом (15.125):

$$|\xi|^2 = |\eta|^2 = 1 + e^{-2\gamma}. \tag{15.131}$$

Неизвестная фаза все еще остаётся в этом соотношении, хотя мы знаем, что при $\gamma \gg 1$ имеем предел изолированной точки поворота, когда все константы Стокса равны i (уравнение (15.104)).

Чтобы найти вероятность прохождения, предположим, что падающая волна приходит слева, хотя результат будет таким же и для волны, идущей справа (задача 9.1). Тогда $B_1 = 0$, и матрица $\widetilde{M}$ определяет коэффициент отражения,

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{\beta}{\alpha}\right|^2 = \frac{1}{|\eta|^2} = \frac{1}{1+e^{-2\gamma}} = \frac{e^{2\gamma}}{1+e^{2\gamma}}, \tag{15.132}$$

и коэффициент прохождения,

$$T = \left| \frac{A_1}{A} \right|^2 = \frac{1}{|\alpha|^2} = \frac{1}{|\eta e^{\gamma}|^2} = \frac{1}{1 + e^{2\gamma}}. \tag{15.133}$$

Конечно, автоматически $R + T = 1$ в силу (15.128). Результаты (15.132) и (15.133) справедливы для любой ширины барьера и имеют простой смысл. Для далёких точек поворота с квазиклассической областью между ними, $\gamma \gg 1$, и мы возвращаемся к простому результату (2.59), $T \to T_1 = e^{-2\gamma}$. Вероятность отражения может быть представлена в виде бесконечного ряда,

$$R = 1 - e^{-2\gamma} + (e^{-2\gamma})^2 - \dots = 1 - T_1 + T_1^2 - \dots . \tag{15.134}$$

Это можно интерпретировать в духе суммы по путям: R становится меньше единицы из-за вероятности одиночного туннелирования T_1, но мы можем вернуться назад после туннелирования туда и обратно $(+T_1^2)$ и т. д. Процессы возвращения высшего порядка были проигнорированы при выводе (2.59).

Квазиклассический результат (15.133) является точным для потенциала перевернутой параболы,

$$U(x) = U_B - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \text{ где } U_B \text{ — это высота барьера.} \tag{15.135}$$

Задача 15.8

Найти параметр проницаемости γ для параболического барьера (15.135).

Решение.

$$\gamma(E) = \frac{\pi(U_B - E)}{\hbar\omega}. \tag{15.136}$$

В этом случае можно использовать точное решение уравнения Шрёдингера в терминах так называемых функций параболического цилиндра [96]. Это полезно, так как во многих приложениях барьер может быть аппроксимирован параболой. Несколько иной подход, полностью основанный на использовании матриц связи, предложен в [97].

15.12 Подход с использованием интеграла по путям

Квазиклассическое (ВКБ) приближение, детально рассмотренное выше, можно считать приближением геометрической оптики к точной теории интеграла по путям (глава 7). Выше мы работали с классическими траекториями или их продолжениями в комплексную плоскость. В классических областях эти пути соответствуют стационарной фазе и дают основной вклад в функциональный интеграл.

Чтобы перевести явным образом квазиклассический подход на язык интеграла по путям, напомним, что квантовый пропагатор (для простоты мы используем обозначения для одномерного движения) может быть записан в виде функционального интеграла (7.179),

$$G(x,t;x',t') = \int \widetilde{D}x(\tau)e^{(i/\hbar)S[x(\tau)]}, \tag{15.137}$$

где $\widetilde{D}$ включает в себя бесконечное произведение нормировочных множителей (7.192) и S есть классическое действие (7.174),

$$S[x(t)] = \int_{t'}^{t} d\tau\, \mathcal{L}\Big(x(\tau), \dot{x}(\tau)\Big), \tag{15.138}$$

вдоль траектории $x(\tau)$ с фиксированными концами, $x(t') = x'$, $x(t) = x$. В квазиклассической ситуации действие намного больше, чем квант действия $\hbar$, и разным путям соответствуют сильно осциллирующие амплитуды, которые интерферируют и гасят друг друга, за исключением тех траекторий, которые отвечают экстремуму действия и стационарной фазе в интеграле (15.137).

В стационарных задачах пропагатор (15.137) зависит только от $t - t'$,

$$G(x,t;x',t') = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x')e^{-(i/\hbar)E_n(t-t')}, \tag{15.139}$$

где $\{\psi_n(x)\}$ — полный набор стационарных волновых функций с энергиями E_n. Тогда можно положить $t' = 0$ и работать в энергетическом представлении,

$$G_E(x,x') = \int_0^{\infty} dt\, e^{(i/\hbar)Et}G(x,t;x',0). \tag{15.140}$$

Здесь появляется так называемое *редуцированное действие*, $S + Et$. Для частицы в потенциале $U(x)$, эта функция даётся интегралом $\int dx\, p(x)$ от классического импульса вдоль траектории, в то время как S является полной фазой волновой функции (уравнения (15.34)–(15.39)). Условие стационарности фазы (15.38) определяет доминирующую траекторию и квазиклассическое приближение для волновой функции, как описано выше. Однако это траектория является единственным решением классических уравнений движения только в классически разрешенной области, $E > U(x)$. В противоположность этому, если $U(x) > E$, уравнение стационарной фазы (15.38) не имеет действительных решений (в вещественном времени t).

Задача 15.9

Найти классическое действие (15.138) для движения частицы в потенциале перевернутой параболы (15.135), а также стационарные точки для пути под барьером между точками поворота a и b при энергии E.

Решение.

Из классического уравнения движения, $m\ddot{x} = -dU/dx$ или $\ddot{x} = \omega^2 x$, находим общее решение $x(\tau)$ в терминах гиперболических функций, и, принимая во внимание граничные условия, $x(0) = x'$, $x(t) = x$, приходим к выражению

$$S(x, x'; t) = \frac{m\omega}{2\sinh(\omega t)}\left[(x^2 + x'^2)\cosh(\omega t) - 2xx'\right] - U_B t. \qquad (15.141)$$

Взяв производную $\partial/\partial t$, мы видим, что уравнение (15.36), $\partial\varphi/\partial t = -E$ с $x' = a$ и $x = b$, где $E = U(a) = U(b)$, может быть выполнено при вещественном времени t, только если $E > U_B$. Для подбарьерного движения можно найти бесконечное количество *комплексных* решений t_n, разнесённых по мнимой оси, как $\mathrm{Im}(t_n) = -i(2n + 1)\pi/\omega$.

В общем, описание туннелирования с помощью классических траекторий требует *мнимого времени*; можно вспомнить в этой связи обсуждение времени туннелирования в разделе 9.5. Классическое уравнение движения с заменой $t \to -i\tau$, где τ действительно совпадает с таковым для реального времени, но с *перевернутым потенциалом*. Периодичность в мнимом времени, $2\pi/\omega$, найденная в задаче 15.9, соответствует классическому периоду по действительному времени в этом перевернутом потенциале, и, следовательно, её можно интерпретировать как результат *многократных отражений* волнового пакета от барьера. Теперь все эти траектории дают вклад в амплитуду туннелирования. Картина в комплексной плоскости довольно сложная, но может быть понята так, что суммирование таких вкладов

воспроизводит [98] уравнение (15.133), которое мы уже интерпретировали (уравнение (15.134)) в терминах многократных отражений. Подход интеграла по путям позволяет идти дальше и учесть не только квазиклассические траектории, но также и соседние пути, которые отвечают за отклонения от геометрической оптики, такие как дифракционные эффекты в многомерном движении, особенно в квантовой теории поля, в которой аналоги траектории в перевёрнутом потенциале называются *инстантонами*.

В квазиклассическом пределе с малой амплитудой подбарьерных процессов многократные отражения маловероятны, и главная траектория даёт лидирующий вклад. Результат можно оценить с помощью классического действия по этой «мнимой» траектории. Ограничиваясь ведущим экспоненциально малым членом, имеем для вероятности перехода между (в общем случае многомерными) конфигурациями A и B оценку

$$P_{BA} \sim \left| e^{(i/\hbar)S(B,A)} \right|^2 = e^{-(2/\hbar)\mathrm{Im}[S(B,A)]}. \tag{15.142}$$

Такая оценка весьма полезна, например, в химических реакциях, когда два атома при достаточно высокой кинетической энергии образуют неустойчивую молекулу (димер), которая снова распадается на атомы в возбужденном состоянии (так называемое *столкновение второго рода*). Полная энергия сохраняется, но происходит переход между двумя конфигурациями с различными потенциальными функциями $U_{A,B}(r)$ межатомного взаимодействия. Уравнение (15.142) может быть применено, если эти потенциалы «пересекаются» на мнимом расстоянии r_0,

$$U_A(r_0) = U_B(r_0). \tag{15.143}$$

Тогда вероятность перехода может быть оценена как

$$P_{BA} \sim e^{-(2/\hbar)\mathrm{Im}[S(B,r_0)+S(r_0,A)]}. \tag{15.144}$$

Важное обобщение этого подхода связано с расчётом *плотности уровней* квантовых систем. Простейшие случаи были рассмотрены в главе 3. Метод функционального интеграла позволяет развить мощный инструмент, практически весьма полезный по крайней мере для систем с небольшим числом степеней свободы [5, 90]. Рассматривая системы с дискретным спектром энергии (или в большом объёме квантования, как в главе 3), можно представить пропагатор в виде (15.139) и перейти к энергетическому представлению (15.140). Чтобы интеграл по времени сходился, рассмотрим его как предел интеграла при комплексной энергии, которая приближается

к реальной оси сверху, $E \to E + i0$. Здесь $i0$ означает бесконечно малую мнимую часть $i\eta$, $\eta \to +0$. Тогда интеграл по времени даёт

$$G_E(x, x') = i\hbar \sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{E - E_n + i0}, \tag{15.145}$$

где x и x' — обобщённые многомерные координаты. След этой функции, рассматриваемой как оператор в x-представлении, даётся выражением

$$\operatorname{Tr} G_E = \int dx\, G_E(x, x) = i\hbar \sum_n \frac{1}{E - E_n + i0}, \tag{15.146}$$

где использована ортонормированность собственных функций $\psi_n(x)$.

Во многих случаях приходится сталкиваться со знаменателями, как в (15.146). Рассмотрим внимательнее этот предел: для любого действительного z

$$\lim_{\eta \to +0} \frac{1}{z + i\eta} = \lim_{\eta \to +0} \frac{z - i\eta}{z^2 + \eta^2}. \tag{15.147}$$

Действительная часть здесь,

$$\lim_{\eta \to +0} \frac{z}{z^2 + \eta^2} \equiv \mathrm{P.v.}\, \frac{1}{z}, \tag{15.148}$$

представляет собой *главное значение*, которое равно $1/z$, если $z \neq 0$, и нулю, если $z = 0$. Если это выражение входит под интеграл $\int dz$, мы должны исключить точку $z = 0$ из интеграла с помощью симметричного предела, $\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dz$. Мнимая часть выражения (15.147) равна

$$-i \lim_{\eta \to +0} \frac{\eta}{z^2 + \eta^2} = -i\pi\delta(z), \tag{15.149}$$

где мы воспользовались свойствами дельта-функции (раздел 3.3), а множитель π возникает из-за нормировки (3.19). Действительно, выражение (15.149) является чётной функцией z, которая равна нулю при $\eta \to +0$, если $z \neq 0$, и обращается в $+\infty$, если $z = 0$.

Таким образом,

$$\lim_{\eta \to +0} \frac{1}{z + i\eta} = \mathrm{P.v.}\, \frac{1}{z} - i\pi\delta(z). \tag{15.150}$$

Теперь видно, что плотность уровней системы (уравнение (3.83)) прямо связана со следом пропагатора (15.146),

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = \frac{1}{\pi\hbar} \operatorname{Re}\Big[\operatorname{Tr} G_E\Big]. \tag{15.151}$$

В подходе интеграла по путям след пропагатора G_E даётся суммой вкладов траекторий, которые *замкнуты*, так как $x' = x$. В квазиклассической ситуации вычисление плотности уровней сводится к сумме по *периодическим* классическим орбитам. Так как ведущий вклад дают траектории с наименьшим действием, на практике нам часто нужны только кратчайшие периодические орбиты, которые полностью определяются симметрией системы. Детальное изучение этой обширной темы выходит за рамки наших лекций.

Дополнительная литература: [5, 90–95, 97, 98].

Список литературы

1. Landau L.D. // JETP. — 1941. — Vol. 11. — P. 592.
2. Anderson P.W. // Rev. Mod. Phys. — 1966. — Vol. 38. — P. 298.
3. Jammer M. The Conceptual Development of Quantum Mechanics. — N.Y. : McGraw-Hill, 1966.
4. Weisskopf V.F. Physics in the Twentieth Century. — Cambridge : MIT Press, 1972.
5. Brack M., Bhaduri R.K. Semiclassical Physics. — Reading : Addison-Wesley, 1997.
6. The Theory of Symmetry Actions in Quantum Mechanics / G. Cassinelli, E. de Vito, A. Levrero, P.J. Lahti. — Berlin : Springer, 2004. — Vol. 54 of Lect. Notes Phys.
7. Messiah A. Quantum mechanics. — Mineola : Dover Publications, 1999. — 2 volumes in 1.
8. Mirman R. Group Theory: An Intuitive Approach. — Singapore : World Scientific, 2000.
9. Pauli W. Wave mechanics. — Mineola : Dover Publications, 2000. — Vol. 5 of Pauli Lectures on Physics.
10. Bohr A., Mottelson B.R., Ulfbeck O. // Foundations of Physics. — 2004. — Vol. 34. — P. 405.
11. Bohr A., Mottelson B.R. Nuclear Structure. — Singapore : World Scientific, 1998. — Vol. 1 and 2.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. — 8 изд. — М. : Физматлит, 2012. — Т. 2. — С. 536. — ISBN: 5-9221-0056-4.

13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. — 5 изд. — М. : Физматлит, 2012. — Т. 1. — С. 224. — ISBN: 978-5-9221-0819-5.

14. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. — 4 изд. — М. : Физматлит, 2002. — Т. 4. — С. 720. — ISBN: 5-9221-0058-0. — Курс Ландау-Лифшица.

15. Sources in Quantum Mechanics. — Mineola : Dover Publications, 1968. — Vol. 5 of Classics of Science.

16. Bohr A., Ulfbeck O. // Rev. Mod. Phys. — 1995. — Vol. 1. — P. 67.

17. Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloe F. Quantum Mechanics. — Wiley-Interscience, 2006. — Vol. 1 and 2.

18. Broglie L. De. Les Incertitudes D'Heisenberg et L'Interprétation Probabiliste de la Mécanique Ondulatoire. — Paris : Bordas, 1982.

19. Havin V., Jöricke B. The Uncertainty Principle in Harmonic Analysis. — Springer, 1994.

20. Bialynicki-Birula I., Mycielski J. // Comm. Math. Phys. — 1975. — Vol. 44. — P. 129.

21. Beckner W. // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. — 1975. — Vol. 72. — P. 638.

22. Anderson M.H., et al. // Science. — 1995. — Vol. 265. — P. 198.

23. Bohm A. Quantum Mechanics: Foundations and Applications. — 2 edition. — N.Y. : Springer, 1986.

24. Byron F.W., Fuller R.W. Mathematics of Classical and Quantum Physics. — Mineola : Dover Publications, 1992.

25. Dirac P.A.M. The Principles of Quantum Mechanics. — 4 edition. — Oxford University Press, 1968.

26. Schwinger J. Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements. — Springer, 2001.

27. Bohm D. // Phys. Rev. — 1952. — Vol. 85. — P. 166, 180.

28. Fleming G.N. // Nuovo Cim. A. — 1973. — Vol. 16. — P. 232.

29. Feynman R.P., Hibbs A.R. Quantum Mechanics and Path Integrals. — N.Y. : McGraw-Hill, 1965.

30. Feynman R.P. // Rev. Mod. Phys. — 1948. — Vol. 20. — P. 367.

31. Weinberg S. Quantum Field Theory. — Cambridge University Press, 1995. — Vol. 1.

32. Margolis N., Levitin L.B. // Physica D. — 1998. — Vol. 120. — P. 188.

33. Mandelshtam L., Tamm I. // J. Phys. (Moscow). — 1945. — Vol. 9. — P. 249.

34. Perelomov A.M., Zel'dovich Ya.B. Quantum Mechanics: Selected Topics. — Singapore : World Scientific, 1998.

35. Wang S. // Phys. Rev. A. — 1999. — Vol. 60. — P. 262.

36. Zachos C., Fairlie D., Curtright T. Quantum Mechanics in Phase Space. — Singapore : World Scientific, 2005.

37. Justin J. Zinn. Path Integrals in Quantum Mechanics. — 2004.

38. Fleischer R. // Phys. Rep. — 2002. — Vol. 370. — P. 537.

39. C.S. Wu, E. Ambler, R.W. Hayward et al. // Phys. Rev. — 1957. — Vol. 105. — P. 1413.

40. C.S. Wood, S.C. Bennett, D. Cho et al. // Science. — 1997. — Vol. 275, no. 5307. — P. 1759.

41. Gilmore R. Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications. — N.Y. : Wiley Interscience, 1974.

42. Hess K. Advanced Theory of Semiconductor Devices. — Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1988.

43. Hoddeson L., Baym G., Eckert M. // Rev. Mod. Phys. — 1987. — Vol. 59. — P. 287.

44. Schensted I.V. A Course on the Application of Group Theory to Quantum Mechanics. — Maine : Neo Press, 1976.

45. Wigner E.P. Symmetries and Reflections. — Bloomington : Indiana University Press, 1967.

46. Dwight H.B. Tables of Integrals and Other Mathematical Data. — 4 edition. — N.Y. : Macmillan Company, 1961.

47. Olver F.W.J. Asymptotics and Special Functions. — N.Y. : Academic Press, 1974.

48. Taylor J.R. Scattering theory: the quantum theory of nonrelativistic collisions. — N.Y. : Wiley, 1972.

49. Baz' A.I. // JETP. — 1959. — Vol. 36. — P. 1762.

50. Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 136. — P. B864.

51. Feynman R.P., Leighton R.B., Sands M. The Feynman lectures on physics: Quantum mechanics. — Addison-Wesley, 1965.

52. Stoyanov Ch., Zelevinsky V. // Phys. Rev. C. — 2004. — Vol. 70. — P. 014302.

53. Dicke R.H. // Phys. Rev. — 1954. — Vol. 93. — P. 99.

54. Horoi M., Volya A., Zelevinsky V. // Phys. Rev. Lett. — 1999. — Vol. 82. — P. 2064.

55. Golub G.H., Loan C.F. Van. Matrix Computations. — Baltimore : Johns Hopkins University Press, 1996.

56. Reimann S., Manninen M. // Rev. Mod. Phys. — 2002. — Vol. 74. — P. 1283.

57. Moshinsky M., Smirnov Y.F. The Harmonic Oscillator in Modern Physics. — Amsterdam : Harwood Academic Publishers, 1996. — Vol. 9 of Contemporary Concepts in Physics.

58. L.-A. Wu, H.J. Kimble, J.L. Hall, H. Wu // Phys. Rev. Lett. — 1986. — Vol. 57. — P. 2520.

59. Wald R.M. General Relativity. — Chicago : The University of Chicago Press, 1984.

60. Unruh W.G. // Phys. Rev. D. — 1976. — Vol. 14. — P. 4.

61. Carruthers P., Nieto M.M. // Rev. Mod. Phys. — 1968. — Vol. 40. — P. 411.

62. Caves C.M. // Phys. Rev. D. — 1981. — Vol. 23. — P. 1693.

63. Wall D.F. // Nature. — 1983. — Vol. 306. — P. 141.

64. Aharonov Y., Bohm D. // Phys. Rev. — 1959. — Vol. 115. — P. 485.

65. Ehrenberg W., Siday R.E. // Proc. Phys. Soc. B. — 1949. — Vol. 62. — P. 8.

66. Peshkin M., Tonomura A. The Aharonov-Bohm Effect. — Berlin : Springer, 1989. — Vol. 340 of Lect. Notes Phys.

67. Landau L.D. // Zs. Phys. — 1930. — Vol. 64. — P. 629.

68. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. — М. : Физматлит, 2010. — Т. 5. — С. 616. — ISBN: 5-9221-0054-0. — Часть 1.

69. The Quantum Hall Effect / Ed. by R.E. Prange, S.M. Girvin. — N.Y. : Springer, 1987.

70. von Klitzing K., Dorda G., Pepper M. // Phys. Rev. Lett. — 1980. — Vol. 45. — P. 494.

71. Tsui D.C., Störmer H.L., Gossard A.C. // Phys. Rev. Lett. — 1982. — Vol. 48. — P. 1559.

72. Laughlin R.B. // Phys. Rev. Lett. — 1983. — Vol. 50. — P. 1395.

73. Feldman A., Kahn A.H. // Phys. Rev. B. — 1970. — Vol. 1. — P. 4584.

74. Berry M., Peshkin M. // Physics Today. — 2010. — P. 9. — August.

75. Silverman M.P. Quantum Superposition. — Berlin : Springer, 2008.

76. Stone M. Quantum Hall Effect. — Singapore : World Scientific, 2001.

77. von Klitzing K. // Rev. Mod. Phys. — 1986. — Vol. 86. — P. 519.

78. Yang C.N. // Rev. Mod. Phys. — 1962. — Vol. 34. — P. 694.

79. Aslamazov L.G., Larkin A.I. // JETP Lett. — 1965. — Vol. 48. — P. 875.

80. Josephson B.D. // Phys. Lett. — 1962. — Vol. 1. — P. 25.

81. Taylor B., Parker W., Langenberg D. Fundamental Constants and Quantum Electrodynamics. — Academic Press, 1969.

82. Tilley D.R., Tilley J. Superfluidity and Superconductivity. — 2 edition. — Bristol : Adam Hilger, 1986.

83. Hall H.E., Vinen W.F. // Proc. Roy. Soc. A. — 1956. — Vol. 238. — P. 204.

84. Donnelly R.J. // Annu. Rev. Fluid Mech. — 1993. — Vol. 25. — P. 325.

85. F. Chevy, K. Madison, V. Bretin, J. Dalibard. — cond-mat/0104218.

86. Feynman R.P. Progress in Low Temperature Physics / Ed. by C.J. Gorter. — Amsterdam : Borth Holland, 1955. — Vol. 1. — p. 17.

87. Barone A., Paterno G. Physics and Applications of the Josephson Effect. — N.Y. : John Wiley & Sons, 1982.

88. Saslow W.M. Electricity, Magnetism, and Light. — Academic Press, 2002.

89. Sonin E.B. // Rev. Mod. Phys. — 1987. — Vol. 59. — P. 87.

90. Gutzwiller M.C. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. — N.Y. : Springer, 1990.

91. Babikov V.V. // Sov. Phys. Usp. — 1967. — Vol. 10. — P. 271.

92. Calogero F. Variable Phase Approach to Potential Scattering. — N.Y. : Academic Press, 1967.

93. Presnyakov L.P. // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 44. — P. 5636.

94. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — 6 изд. — М. : Физматлит, 2004. — Т. 3. — С. 800. — ISBN: 5-9221-0530-2.

95. Heading J. An Introduction to Phase Integral Methods. — London : Methuen, 1962.

96. Kemble E.C. // Phys. Rev. — 1935. — Vol. 48. — P. 549.

97. Fröman N., Fröman P.O. JWKB Approximation. — Amsterdam : North-Holland, 1965.

98. Brink D.M., Smilansky U. // Nucl. Phys. — 1983. — Vol. A405. — P. 301.

Предметный указатель

А

адиабатический инвариант, 24
аксиальный вектор, 268
алгебра SU(1,1), 415
алгебра Гейзенберга–Вейля, 388
алгоритм Ланцоша, 360
альфа-распад, 64
амплитуда вероятности, 167
антикоммутатор, 183
антилинейные преобразования, 264
атом водорода, 27
    отрицательный ион, 148

В

вариационный метод Рэлея–Ритца, 342
вариационный принцип, 337
вектор Рунге–Ленца, 246
вероятностная интерпретация, 131
вероятность выживания, 236
виртуальные процессы, 159
вихревая решетка, 470
внутренняя чётность, 271
волновая функция
    асимптотическая, 300, 318
    вероятностная интерпретация, 47, 100, 167
    волновой пакет, 99, 123, 135
    гармонического осциллятора, 377
    затухающая, 128
    квазиклассическая, 94, 477
    макроскопическая, 455
    монохроматическая, 50
    нормировка, 47, 76, 168
    ортогональность, 70, 178
    полнота, 70, 93
    пробная, 340
    расплывание, 138
    релятивистский волновой пакет, 139
    узлы, 69
    уровни Ландау, 436
    условие сшивки, 485
    эволюция во времени, 75, 99, 139
волны де Бройля, 43
вращение молекулы, 150
время задержки, 310
вронскиан, 305, 363
вырожденная гипергеометрическая функция, 373
вырожденные состояния, 35, 46, 67, 180, 201, 217, 283, 305, 381, 434

Г

гамильтониан, 211, 425
гамма-функция, 316
гармонический осциллятор, 26
  волновые функции, 377
  двумерный, 379
  динамика, 213, 232
  изотропный, 380
  когерентное состояние, 402
  операторное решение, 392
  эквидистантный спектр, 368
гауссовский волновой пакет, 141
генератор, 193
генератор вращения, 115
генератор пространственного сдвига, 110
геометрическая оптика, 94, 481
гигантский резонанс, 356
гидродинамическая аналогия, 224, 454
гипергеометрическое уравнение, 367
глубина проникновения, 58
гомоморфизм, 287
граничное условие, 52
групповая скорость, 136
группы
  абелевы, 116
  Лоренца, 288
  неабелевы, 116
  непрерывные, 193
  пространственные, 284
  сопряжённые классы, 286
  унитарные, 190
  циклические, 289

Д

двухатомная молекула, 149
двухквантовый источник, 408
двухуровневая система, 343
дельта-функция, 72, 125
диагонализация, 187
диамагнитный ток, 428
дипольный момент, 240, 273
дискретный спектр, 363
дифракция, 127
доплеровское уширение, 156
дополнительность, 131, 165
дополнительные квантовые числа, 202

З

закон Био–Савара, 29
закон Ома, 439
закон Снеллиуса, 53
затухающая волна, 128
зеркальное отражение, 270

И

импульсное представление, 99, 177, 218
инвариантное подпространство, 288
инвариантность
  относительно обращения времени, 261
индуцированное излучение, 391
интеграл Гаусса, 254
интеграл по путям, 508
интеграл по траекториям, 246
интерпретация Бома, 225
интерференция, 130, 168
информационная энтропия, 204

К

калибровочная инвариантность, 424, 448
канонический импульс, 423
каноническое преобразование, 382, 403, 409
картина Гейзенберга, 229

картина Шрёдингера, 229
квазиимпульс, 277
квазиклассический, 406
квазиклассический матричный элемент, 493
квазиклассическое квантование, 34, 446
квазистационарное состояние, 27, 153, 333
квазичастицы, 443
квант, 19
квантование, 146
квантование Бора–Зоммерфельда, 490
квантование магнитного потока, 431, 448, 471
квантование орбитального момента, 44
квантовое гало, 59, 79
квантовое состояние
  вакуумное, 389
  вектор в гильбертовом пространстве, 174
  квазистационарное, 27, 333, 351
  когерентное, 395
  когерентное магнитное, 450
  локализованное, 109
  резонансное, 85
  связанное, 67, 143, 341
  сжатое, 413
  стационарное, 50
  условие полноты, 401
квантовые вихри, 466
квантовый оператор
  векторный, 108
  вращения, 115, 194
  единичный, 180
  импульса, 103, 197
  коммутационные соотношения, 105
  комплексно сопряжённый, 182
  координаты, 103, 197
  лестницы, 387
  линейные, 179
  математическое ожидание, 103
  матричное представление, 181
  нормальное упорядочение, 398
  обратный, 117
  обращения времени, 261
  орбитального момента, 108, 115
  повышающий, 390
  понижающий, 390
  представление, 105
  преобразование, 191
  проекционный, 194
  пространственного сдвига, 194, 397
  псевдоскаляр, 267
  рождения, 391
  сдвига, 111
  скаляр, 267
  собственная функция, 109
  собственное значение, 109
  транспонировать, 182
  унитарный, 244
  уничтожения, 391
  уравнения движения, 230
  фаза, 455
  фазы, 407
  числа квантов, 389, 407
  эрмитов, 182
квантовый хаос, 349
квантовый эффект Холла, 439
кванты осциллятора, 391
классический радиус электрона, 31
колебания молекул, 150, 283

комбинационный принцип Ритца, 23
коммутатор, 106, 181, 230, 245, 426
комптоновская длина волны, 30, 161
конденсат Бозе — Эйнштейна, 209, 456
конфигурационное пространство, 46
корпускулярно-волновой дуализм, 134
коэффициент отражения, 55, 303, 327, 506
коэффициент прохождения, 55, 303, 327, 507
кристаллическая решётка, 274
кристаллический импульс, 277
кубит, 344
кулоновский барьер, 64
куперовские пары, 462

Л

лемма Шура, 290
лестничная конструкция, 387
линейный источник, 403
линии Стокса, 498
логарифмическая производная, 84

М

магнетон Бора, 39
магнитное зеркало, 56
магнитное квантовое число, 35
магнитное поле, 56, 423
магнитный момент
 аномальный, 41
 нейтрона, 41
 орбитальный, 39
 протона, 41
 электрона, 39
макроскопическая когерентность, 453
матрица перехода, 308, 505
матрица рассеяния S, 309
матричный элемент, 181, 215, 390, 493
мезонный обмен, 160
метод Лапласа, 318
мнимое время, 64, 312, 509
многосвязная геометрия, 466
множитель Лагранжа, 338
момент импульса
 квантование, 163
мультиполь-мультипольная сила, 356

Н

наблюдаемые, 196
недиагональный дальний порядок, 456
неортогональный базис, 343
непересечение уровней, 346
непреводимое представление, 288
непрерывный спектр, 301
неравенство треугольника, 177
несохранение чётности, 271

О

обозначения Дирака, 105, 175
оболочечная структура, 381
обратимость, 265
обратная решётка, 274
одновременная измеримость, 200
одномерное
 рассеяние, 324
одномерное движение, 67
 в континууме, 299
 связанное, 67
оптическая теорема, 327
орбитальный момент, 35

сохранение, 243
ортогонализация, 186
осцилляционная теорема, 364

П

параметр Зоммерфельда, 65
периодические условия, 92
плоская волна, 46, 109
плоский ротатор, 219
плотность вероятности, 50, 167, 222
плотность уровней, 510
полиномы Лагерра, 373, 385
полиномы Эрмита, 373
полное отражение, 304
полярный вектор, 268
постоянная Планка, 18
постоянная Ридберга, 23
постоянная тонкой структуры, 29
постоянная Холла, 441
постулаты Бора, 23
потенциал
векторный, 130
возмущения, 330
гармонического осциллятора, 25, 365
гравитационный, 146
дельта-функции, 82, 327
Кулона, 27
кулоновский, 246
нелокальный, 215, 223
однородная функция, 236
периодический, 276
стена, 53
электромагнитный, 130, 424
яма, 82
ящик, 68, 206
потенциал Юкавы, 33, 160
потенциальная стенка, 51
потенциальный барьер, 62
поток вероятности, 48
правила отбора, 273
правила сумм, 239
правило сумм Томаса–Райхе–Куна (ТРК), 241
представления групп, 286
преобразование базиса, 189
преобразование Боголюбова, 409
приближение Борна, 332
приближение Борна–Оппенгеймера, 151
приближение Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ), 475
приведённая масса, 32, 151
принцип Гюйгенса, 251
принцип исключения Паули, 148
принцип минимальности, 423
принцип соответствия, 36
принцип суперпозиции, 50, 168
проводимость Холла, 442
проникновение под барьер, 58
пространственная инверсия, 266
пространственное квантование, 117, 161
пространственно-неподвижная система, 285
процесс переброса, 279

Р

радиус Дебая, 34
разделение переменных, 379
распределение Вигнера, 227
распределение Лоренца, 154
распределение Пуассона, 399
расталкивание уровней, 346
растянутые координаты, 96
резонансная флуоресценция, 156
релятивистское соотношение неопределённости, 161

С

сверхизлучение, 356
сверхпроводники, 461
сверхтекучая, 455
свойство перестановки, 291
связанные осцилляторы, 412
секулярное уравнение, 342
сила Лоренца, 424, 444
симметрия
  калибровочная, 424
  относительно обращения времени, 261
  отражения, 80
  преобразования, 111
  решётки, 274
  спонтанное нарушение, 245
система, скреплённая с телом, 285
скалярное произведение, 175
скобки Пуассона, 231
слабое взаимодействие, 271
случайное вырождение, 35
собственная функция, 109
собственное значение, 109, 187
собственные значения, 179
собственные функции
  орбитальный момент, 116
соотношение неопределённостей, 110, 123, 161, 199, 392, 403, 413
сопряжённые линии Стокса, 498
состояние Гамова, 335
спонтанное излучение, 391
стационарная фаза, 137, 251, 484

Т

теорема Бернсайда, 293
теорема вириала, 235
теорема Ирншоу, 22
теорема о непересечении, 347
теоремы Эренфеста, 232
теория возмущений
  внезапное, 77
  слабое, 347
тепловое равновесие, 418
тождество Якоби, 107
ток вероятности, 428
точка
  поворота, 95
точка поворота, 62, 489
трёхдиагональная матрица, 361
туннелирование, 60, 311, 335, 461

У

угловой момент
  вращение, 164
  орбитальный, 115
  прецессия, 164
удвоение перехода, 355
умножение матриц, 176
уравнение непрерывности, 49, 222, 302, 480
уравнение Риккати, 479
уравнение Шрёдингера, 211, 251
уравнение Эйлера, 316
уровни Ландау, 431
усечённый базис, 342
условия сшивки, 55

Ф

фаза рассеяния, 334
фазовая скорость, 136
фигуры Лиссажу, 381
формула Бальмера, 23
формула Стирлинга, 320
формулы сшивки, 501
фотон, 21
фотоны, 92
фотоэффект, 20
фрагментация интенсивности, 352

функции Бесселя, 314, 464
функции Блоха, 275
функциональный интеграл, 246
функция Гаусса, 73
функция Грина, 76
- время эволюции, 77
- гармонического осциллятора, 378
- одномерное рассеяние, 324
- операторная форма, 355
- эволюция во времени, 139

функция Рауса, 468
функция Эйри, 314, 486

Х

характеры, 293
химический потенциал, 456
холодная эмиссия, 63

Ц

центр симметрии, 284
центральная симметрия, 96
центробежный потенциал, 383
циклотронная частота, 432, 445
циркуляция, 429, 466

Ч

частота Раби, 350
чётность, 70, 81, 220, 266, 341

Ш

ширина уровня, 155

Э

экранирование, 33, 148
эксперимент Дэвиссона–Джермера, 43
эксперимент Резерфорда, 22
эксперимент Фриша, 21
электрическое поле, 64, 233, 312, 404
электродинамика Лондона, 471
электродинамика Пиппарда, 474
элемент симметрии, 284
энергетическое представление, 71, 213
эрмитово сопряжение, 182
эффект Ааронова–Бома, 429
эффект Джозефсона, 226
эффект Комптона, 21
эффект Мейсснера, 472
эффект Мёссбауэра, 158
эффект Рамзауэра–Таунсенда, 89
эффект Унру, 419

Я

явление Стокса, 500
ядерный магнетон, 41
яркое состояние, 352